EUGEN FICK

EINFÜHRUNG IN DIE GRUNDLAGEN DER QUANTENTHEORIE



EUGEN FICK

EINFÜHRUNG IN DIE GRUNDLAGEN DER QUANTENTHEORIE



EUGEN FICK

EINFÜHRUNG IN DIE GRUNDLAGEN DER QUANTENTHEORIE



EINFÜHRUNG IN DIE GRUNDLAGEN DER QUANTENTHEORIE

VON

PROF. DR. EUGEN FICK

LEHRSTUHL FÜR THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK
AN DER TECHNISCHEN HOCHSCHULE DARMSTADT

MIT 95 FIGUREN IM TEXT



AKADEMISCHE VERLAGSGESELLSCHAFT
FRANKFURT AM MAIN 1968

AUSGABE FÜR DIE BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND

Satz und Druck: Paul Dünnhaupt, Köthen

Printed in Germany

Vorwort

Dieses Lehrbuch entstand aus Vorlesungen, die ich an den Technischen Hochschulen München und Darmstadt sowie an der Universität Würzburg hielt. Es ist das Ziel des Buches, den Studierenden in den heutigen Kalkül und die physikalischen Aussagen der Quantentheorie so weit einzuführen, daß er selbst imstande ist, ihre unzähligen Anwendungen in den verschiedenen physikalischen Richtungen weiter zu verfolgen. Besonderer Wert wurde dabei auf die Klärung grundlegender Fragen gelegt.

Die Vertrautheit mit den wichtigsten Begriffen der klassischen Physik wird vorausgesetzt. Um jedoch Lesern mit verschiedenen Vorkenntnissen den Zugang zu ermöglichen, sind im 1. Teil des Buches jene Probleme der klassischen Teilchen- und Feldtheorie zusammengestellt, die für das Verständnis der Quantentheorie notwendig sind. So wird z. B. gezeigt, daß die physikalischen Observablen sowohl im Teilchen- als auch im Feldbild vermöge des Zusammenhangs zwischen Symmetrie und Erhaltungssätzen definiert sind, womit ein entsprechendes quantentheoretisches Vorgehen an späterer Stelle vorbereitet wird. Die Materiewellen werden nach der ursprünglichen SCHRÖDINGERschen Vorstellung als ein klassisches Feld behandelt und damit von der heutigen Interpretation der Quantentheorie abgesetzt, so daß von Anfang an begriffliche Schwierigkeiten bei der Quantisierung dieses Feldes vermieden werden. Da sich das Buch durchweg mit nichtrelativistischen Phänomenen beschäftigt, konnte auf die Besprechung relativistischer Feldgleichungen verzichtet werden.

Im 2. Teil wird der mathematische Kalkül des unitären Raumes entwickelt. Dabei wird nicht eine mathematisch völlig exakte Formulierung angestrebt, vielmehr ist es das Ziel, den Studierenden in anschaulicher Weise, aufbauend auf der ihm bekannten reellen Vektorrechnung, mit den wichtigsten Begriffen vertraut zu machen.

Erst mit dem 3. Teil des Buches beginnt die Behandlung der Quantentheorie. Um ihre charakteristischen Züge besonders deutlich werden zu lassen, wurde eine kompakte Zusammenstellung der Grundlagen angestrebt. Das bedeutet, daß in diesem Teil des Buches auf Beispiele nur insoweit eingegangen wird, als sie zum unmittelbaren

Verständnis der Theorie notwendig sind. Es wird versucht, von vornherein den Leser an eine darstellungsunabhängige Formulierung zu gewöhnen. Aus pädagogischen Gründen schien es mir zweckmäßig, die Vertauschungsrelationen zwischen den physikalischen Observablen zuerst einfach zu postulieren und ihre Begründung auf das später folgende Kapitel „Symmetrie" zu verlegen. Die statistischen Aussagen der Quantentheorie werden ausführlich besprochen, auf die Versuche, den Meßprozeß selbst im Rahmen der Quantentheorie zu verstehen, wird jedoch nicht eingegangen. Die so beliebte Umdeutung der SCHRÖDINGERschen Feldamplitude in eine Wahrscheinlichkeitsamplitude, die erfahrungsgemäß eine Quelle von Mißverständnissen ist, habe ich vermieden. Die quantentheoretische Dynamik wird daher über die explizite Zeitabhängigkeit des statistischen Operators eingeführt.

Im 4. Teil des Buches wird die Quantentheorie einerseits auf verschiedene spezielle Probleme (Oszillator, Drehimpuls, Streutheorie) angewendet und andererseits für identische Teilchen ausgebaut. Der Kalkül der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren im unitären Raum variabler Teilchenzahl vermittelt den Anschluß an die heutige Formulierung der Vielteilchenphysik. Die Quantisierung des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes soll einerseits die Äquivalenz der Quantentheorie des Teilchenbildes mit jener des Feldbildes aufzeigen und andererseits eine Einführung in die Methodik der Feldquantisierung geben.

Die Behandlung von Näherungsmethoden liegt außerhalb der Zielsetzung dieses Buches. Lediglich die elementarsten werden besprochen.

Etwa 120 Aufgaben werden dem Leser zur Vertiefung in den Stoff angeboten. Ihre Lösungen finden sich am Ende des Buches.

Jene Kapitel, die beim ersten Studium überschlagen werden können, sind besonders gekennzeichnet. Der Leser, der mit der klassischen Teilchen- und Feldtheorie vertraut ist, kann — sofern ihm auch der Kalkül des unitären Raumes bekannt ist — sofort mit dem 3. Teil beginnen. All jenen, die neben der Formulierung und Interpretation der Quantentheorie gleich konkrete Beispiele kennenlernen wollen, sei empfohlen, parallel zum 3. Teil bereits die ersten Kapitel des 4. Teiles zu lesen.

Die Gleichungen innerhalb eines Kapitels sind durchlaufend numeriert, die Verweise erfolgen durch einfache Angabe der Gleichungsnummer. Die Gleichungen in anderen Kapiteln hingegen werden voll zitiert, z. B. bedeutet Gl. (3.5–1) die Gleichung (1) im 5. Kapitel des

3. Teils. Die am Kopf jeder Seite befindlichen Ziffern in eckigen Klammern kennzeichnen Teil, Kapitel und Paragraph und sollen das Auffinden von Zitaten erleichtern.

Bei der Formulierung des Buches waren mir in unzähligen Diskussionen die Herren Dr. G. SAUERMANN und Dr. H. SCHWEGLER behilflich. Ihnen gilt mein ganz besonderer Dank. Außerdem danke ich Herrn Dipl.-Phys. E. DORMANN sowie den Herren cand. phys. K. BECKER, G. KLEIN, T. PLEFKA und J. REBSCH für die sorgfältige Durchsicht des Manuskriptes und die Anfertigung der Abbildungen. Schließlich gilt mein Dank dem Verlag für die verständnisvolle Zusammenarbeit und die Ausstattung des Buches.

Darmstadt, im Februar 1968

EUGEN FICK

Inhalt

Die mit Stern versehenen Abschnitte können bei der ersten Durchsicht übergangen werden.

Erster Teil

Klassische Behandlung der Materie: Teilchen- und Wellenvorstellung

Zweiter Teil

Der unitäre Vektorraum

Vierter Teil

Durchführung der Theorie

Fünfter Teil

Anhang

ERSTER TEIL

Klassische Behandlung der Materie: Teilchen- und Wellenvorstellung

Erstes Kapitel

Geschichtliche Entwicklung und grundlegende Experimente zur Dualität

§ 1. Die Plancksche Quantenhypothese

a) Die Plancksche Strahlungsformel

Den Grundstein zur Quantentheorie legte M. PLANCK im Jahre 1900. Die Untersuchungen der Hohlraumstrahlung zeigten, daß ihr beobachtetes Frequenzspektrum (Fig. 1) nicht für alle Frequenzen durch eine Theorie beschrieben werden kann, in der das Strahlungsfeld, die Atome der Hohlraumwände und die gegenseitige Wechselwirkung nach den Gesetzen der klassischen Physik behandelt werden. Um diese Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie zu beseitigen, machte PLANCK die fundamentale Annahme, daß die Energie der Wandatome — diese idealisiert durch lineare Oszillatoren — nicht wie in der klassischen Mechanik kontinuierliche Werte annehmen kann, sondern nur diskreter Werte

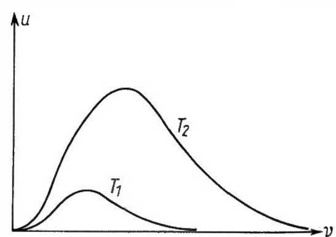


Fig. 1. Spektralverteilung der Hohlraumstrahlung (Temperatur $T_1 < T_2$)

$$E_n^{\mathrm{osc}} = n h \nu \tag{1}$$

fähig ist. Dabei ist ν die Oszillatorfrequenz, n irgendeine positive, ganze Zahl und h eine Konstante der Dimension einer Wirkung, das PLANCKsche Wirkungsquantum. Durch thermodynamisch-statistische Betrachtungen, die wir hier nicht nachvollziehen wollen, gelang es ihm damit, für die räumliche Energiedichte einer monochromatischen, unpolarisierten Strahlung im thermischen Gleich-

gewicht (Temperatur T, Frequenz ν) die Beziehung

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \tag{2}$$

herzuleiten. Dieses PLANCKsche *Strahlungsgesetz* stimmte mit den Messungen bestens überein. In Gl. (2) bedeutet c die Lichtgeschwindigkeit, k die BOLTZMANN-Konstante. Das PLANCKsche Wirkungsquantum h hat — nach jetzt vorliegenden, genaueren Messungen — den Wert

$$h = 6{,}625 \cdot 10^{-27}\,\text{erg} \cdot \text{s}. \tag{3}$$

In der modernen Quantentheorie ist es üblich, statt h die Konstante

$$\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}054 \cdot 10^{-27}\,\text{erg} \cdot \text{s}} \tag{4}$$

zu verwenden. — Die PLANCKsche Herleitung des Strahlungsgesetzes enthält in heutiger Sicht gewisse Inkonsequenzen, die aber die fundamentale Leistung PLANCKS keineswegs schmälern.

Für *hohe Temperaturen*, $h\nu \ll kT$, ist zu erwarten, daß man von den diskreten Abständen der Energie (1) nichts mehr merkt. In der Tat führt in diesem Fall die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion in Gl. (2) auf die Näherung

$$u^R(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k T, \tag{5}$$

die Lord RAYLEIGH auf der Grundlage der klassischen Physik hergeleitet hat. In ihr kommt die Größe h nicht mehr vor. Bei *hohen Frequenzen*, $h\nu \gg kT$, hingegen macht sich der Quantencharakter (1) wesentlich bemerkbar: Man kann jetzt in Gl. (2) näherungsweise im Nenner die Eins gegenüber der Exponentialfunktion vernachlässigen und erhält

$$u^W(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{kT}}, \tag{6}$$

ein Gesetz, dessen Form W. WIEN bereits 1896 angegeben hatte.

b) Die spezifische Wärme fester Körper

Die PLANCKsche Quantenhypothese benutzte A. EINSTEIN wenige Jahre später (1907), um mit ihr die spezifische Wärme eines Festkörpers herzuleiten: Unter der vereinfachenden Annahme, daß alle N Atome mit *derselben* Frequenz ν schwingen, hat man $3N$ lineare Oszillatoren der Frequenz ν vor sich, weil jede räumliche Schwingung drei Freiheitsgrade besitzt. Die von diesen Oszillatoren herrührende innere Energie $U(T)$ eines Festkörpers erhält man als thermischen Mittelwert, gebildet mit einer BOLTZMANN-Verteilung $e^{-E_n/kT}$,

$$U(T) = 3N \frac{\sum_n E_n e^{-E_n/kT}}{\sum_n e^{-E_n/kT}}. \tag{7}$$

Der Nenner läßt sich bei Berücksichtigung der Quantenhypothese (1) als geometrische Reihe sofort aufsummieren,

$$Z(x) = \sum_n e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}} \qquad \left(x = \frac{h\nu}{kT}\right).$$

Beachtet man, daß der Zähler von Gl. (7) proportional zur Ableitung $Z'(x)$ ist, so resultiert als innere Energie der EINSTEINschen Oszillatoren

$$U(T) = 3Nh\nu \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \tag{8}$$

Im Grenzfall $h\nu \ll kT$ gelangt man zu dem klassischen Gesetz

$$U(T) \approx 3NkT,$$

während für $h\nu \gg kT$ wiederum der Einfluß der Quantenhypothese bedeutend wird:

$$U(T) = 3Nh\nu e^{-\frac{h\nu}{kT}}.$$

Die spezifische Wärme $C = \frac{dU}{dT}$ wird damit für hohe Temperaturen temperaturunabhängig und nimmt bei tiefen Temperaturen ab (Fig. 2). Eine quantitativ bessere Darstellung dieses experimentell nachgewiesenen Abfalls ($\sim T^3$) wurde von P. DEBYE (1912) gewonnen, indem er über die verschiedenen Oszillatorfrequenzen des Festkörpers mittelte.

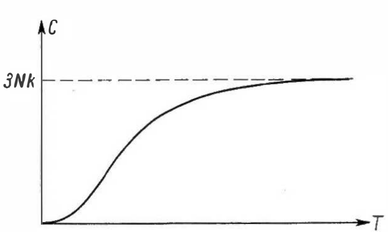


Fig. 2. Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme fester Körper

§ 2. Korpuskeleigenschaften der elektromagnetischen Strahlung

Die Quantenhypothese PLANCKS bezog sich nicht auf das Strahlungsfeld, sondern auf die Energiezustände der Atome (idealisiert durch Oszillatoren). Erst über thermodynamische Gleichgewichtsbetrachtungen gelangte er zu einer Aussage über die Strahlung.

Die Quanteneigenschaften der elektromagnetischen Strahlung formulierte A. EINSTEIN im Jahre 1905 in seiner *Lichtquantenhypothese.* Den Anstoß dazu gab der *Photoeffekt* (LENARD): Läßt man Licht etwa auf eine Metallplatte fallen, so werden aus dem Metall Elektronen ausgelöst (Fig. 3). Die Anzahl der austretenden Elektronen ist proportional der Lichtintensität, *ihre kinetische Energie aber proportional der Frequenz des Lichtes* und unabhängig von seiner Intensität. Dies ist nach der MAXWELLschen Theorie unverständlich.

Fig. 3. Zum Photo-Effekt

Um diesen experimentellen Sachverhalt erklären zu können, behauptete EINSTEIN, daß das Licht der Frequenz ν aus Teilchen (*Photonen* oder *Lichtquanten*)

der Energie

$$\boxed{E^{\mathrm{Ph}} = h\nu = \hbar\omega} \tag{9}$$

bestehe ($\omega = 2\pi\nu$). Über die Energie-Masse-Relation $E = mc^2$ der Relativitätstheorie ergibt sich daraus die (bewegte) Masse[1]) dieser Teilchen

$$m^{\mathrm{Ph}} = \frac{h\nu}{c^2} \tag{10}$$

und somit ein Photonenimpuls

$$p^{\mathrm{Ph}} = m^{\mathrm{Ph}} c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \tag{11}$$

(λ = Wellenlänge des Lichtes) oder vektoriell

$$\boxed{\mathfrak{p}^{\mathrm{Ph}} = \hbar\mathfrak{k}} \tag{12}$$

($\mathfrak{k}$ = Ausbreitungsvektor, $|\mathfrak{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$). Diese Gleichungen stellen die Verbindung zwischen den Teilchengrößen E, $\mathfrak{p}$ und den Wellengrößen ν, $\mathfrak{k}$ dar. Das Bindeglied ist das Wirkungsquantum.

Einstein hat damit in gewisser Weise die Partikelvorstellung von Newton über das Licht aufgegriffen, von der man glaubte, daß sie durch die Vielzahl von Interferenz- und Beugungseffekten, die mit Licht nachgewiesen wurden, widerlegt wäre. *Die Doppelnatur der elektromagnetischen Strahlung, nämlich bei bestimmten Experimenten sich wie Wellen und bei anderen sich wie Teilchen zu äußern,* ist in der folgenden Zeit noch durch andere Versuche erhärtet worden.

Einerseits wurden im Jahre 1912 an Kristallen *Röntgenstrahlinterferenzen* (M. von Laue) erzeugt und damit die Welleneigenschaften dieser elektromagnetischen Strahlen demonstriert: Die im Kristall periodisch angeordneten Atome werden durch den einfallenden Röntgenstrahl zum Mitschwingen gebracht und bilden Zentren von Sekundär-(Streu-)Wellen, die miteinander interferieren und damit in bestimmten Raumrichtungen zu Maxima und Minima der Streuintensität führen.

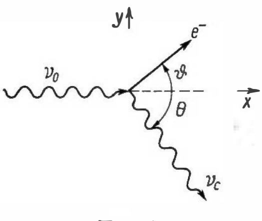


Fig. 4.
Zum Compton-Effekt

Andererseits zeigte Compton (1923) auf eindrucksvolle Weise, daß Röntgenstrahlen Effekte bewirken, wie sie Teilchen der Energie (9) und des Impulses (12) hervorrufen: Läßt man monochromatische Röntgenstrahlen der Frequenz ν_0 auf einen Streukörper, z. B. einen Paraffinblock, fallen und untersucht die seitlich gestreute Strahlung spektral, so findet man eine gegenüber der eingestrahlten Frequenz verschobene Compton-Linie ν_c ($< \nu_0$), deren Verschiebung vom Winkel zwischen dem Primärstrahl und der Streurichtung (Beobachtungsrichtung) abhängt. Die Lage

[1]) Die Ruhmasse m_0 der Photonen ist Null.

dieser Linie läßt sich in einfacher Weise mit der Annahme eines *mechanischen Stoßes zwischen einem Photon und einem Elektron* verstehen (Fig. 4). Bei dieser Rechnung können wir das Elektron als frei betrachten, wenn es zu den äußeren Elektronen eines Atoms gehört, denn die Ablösearbeit ($\approx 1 \cdots 10$ eV) des Elektrons vom Atom ist gegen die Energie der Röntgenstrahlen ($\approx 10^4$ eV) zu vernachlässigen. Bezeichnen wir mit m die (nichtrelativistische) Masse des Elektrons und berücksichtigen wir im Energie- und Impulssatz (zerlegt nach den Richtungen x und y) die EINSTEINschen Beziehungen (9) und (11), so erhalten wir

$$h\nu_0 = h\nu_c + \frac{1}{2} m v^2,$$

$$\frac{h\nu_0}{c} = \frac{h\nu_c}{c} \cos\theta + m v \cos\vartheta,$$

$$0 = -\frac{h\nu_c}{c} \sin\theta + m v \sin\vartheta.$$

Nach Elimination von ϑ folgt hieraus, falls $\nu_0 - \nu_c \ll \nu_0$ ist, für die COMPTON-Verschiebung die Beziehung

$$\nu_c - \nu_0 = -\frac{2h\nu_0^2}{mc^2} \sin^2\frac{\theta}{2}, \tag{13}$$

welche die experimentellen Ergebnisse richtig wiedergibt.

GEIGER und BOTHE haben durch Koinzidenzmessungen nachgewiesen, daß das Elektron und das COMPTON-Photon tatsächlich gleichzeitig erscheinen, wodurch der Nachweis erbracht wurde, daß Energie- und Impulssatz wirklich für den Einzelprozeß erfüllt sind.

Die Doppelnatur des Lichtes läßt sich im Rahmen der klassischen Physik nicht in konsistenter Weise erklären. Diese Schwierigkeit behebt die *Quantentheorie*. In ihr werden nur solche Aussagen gemacht, die sich auf die jeweils vorliegenden Versuchsbedingungen beziehen. Damit wird automatisch verhindert, daß Paradoxien — wie die Wellen- *und* Teilchennatur des Lichtes — auftreten, die durch Abstraktion von der Versuchsapparatur entstehen.

Die quantentheoretische Behandlung des elektromagnetischen Feldes (Quantenelektrodynamik), in der auch der Relativitätstheorie Rechnung getragen werden muß, liegt außerhalb des Rahmens dieses Buches. Wir wollen daher an dieser Stelle nur noch erwähnen, daß man in der Quantenelektrodynamik aus dem Ausdruck der MAXWELLschen Feldenergie [gelesen als Operator (4.6 § 1)]

$$\frac{1}{8\pi} \int (\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{B}^2)\, d^3x$$

tatsächlich die EINSTEINsche Formel (9) für die Energie der Photonen herleiten kann.

§ 3. Die Bohr-Sommerfeldsche Theorie

a) Das Rutherfordsche Atommodell

Einen wichtigen Beitrag zur Kenntnis des Aufbaus der Atome leistete RUTHERFORD (1911): Er beschoß dünne Materieschichten mit α-Strahlen (= zweifach geladene He-Kerne). Da die Masse eines α-Teilchens 7350mal größer ist als die eines Elektrons, wird die Bahn eines α-Teilchens durch die Elektronen kaum beeinflußt. Ihre Ablenkung kommt also praktisch allein durch die Wechselwirkung mit den Kernen zustande. Nimmt man an, daß diese Wechselwirkung auf COULOMBscher Abstoßung beruht, so bewegt sich das α-Teilchen nach den Gesetzen der klassischen Mechanik auf einer Hyperbelbahn, in deren einem Brennpunkt sich der Kern Z befindet (wir setzen voraus, daß dieser wesentlich schwerer als das α-Teilchen ist, so daß man den Kern als ein ruhendes Kraftzentrum ansehen kann). Die Ablenkung θ (Fig. 5) hängt von der Anfangsgeschwindigkeit v_0 und dem Abstand d der Hyperbelasymptote vom Streuzentrum Z ab. Hieraus läßt sich die Anzahl der α-Teilchen berechnen, die aus dem einfallenden Teilchenstrom in einen Winkelbereich zwischen θ und $\theta + d\theta$ gestreut werden. Aus der Übereinstimmung des so berechneten Wirkungsquerschnittes mit den experimentellen Ergebnissen zeigte sich, daß die COULOMB-Energie die entscheidende Wechselwirkung im Atom ist (erst bei Abständen $r \lessapprox 10^{-13}$ cm vom Kern werden die Kernkräfte wirksam, die nicht elektromagnetischen Ursprungs sind).

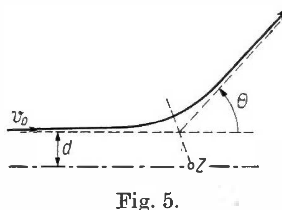


Fig. 5.
Zur RUTHERFORD-Streuung

Aus diesen Ergebnissen schloß RUTHERFORD, daß die negativ geladenen Elektronen im Atom einer COULOMBschen Anziehungskraft unterworfen sind und daher nach der klassischen Mechanik Ellipsenbahnen um den Kern ausführen, ähnlich wie die Planeten sich um die Sonne bewegen.

Gegen dieses RUTHERFORDsche Atommodell läßt sich aber sofort folgender entscheidender Einwand erheben: Die Elektronen führen auf diesen Bahnen eine beschleunigte Bewegung aus und müssen daher nach der klassischen Elektrodynamik dauernd strahlen. Durch den Strahlungsverlust müßte die Bahn des Elektrons immer kleiner werden. Eine Abschätzung zeigt, daß ein Atom damit nur 10^{-8} s existenzfähig sein könnte. Es gäbe keine stabilen Atome.

b) Die Bohrschen Postulate

Die Unhaltbarkeit des RUTHERFORDschen Atommodells führte N. BOHR (1913) und A. SOMMERFELD (1916) zu einer Beschreibung des Atoms, in welche die PLANCKsche Quantenhypothese mit einbezogen wurde.

Zunächst eine Analyse des PLANCKschen Oszillators: Da die PLANCKsche Konstante h die Dimension einer Wirkung hat, konnte man erwarten, daß diese Größe im *Phasenraum* (x, p) eine direkte Bedeutung besitzt. In diesem lautet die PLANCKsche Quantenhypothese

$$\frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m\nu^2 x^2 = E = nh\nu .$$

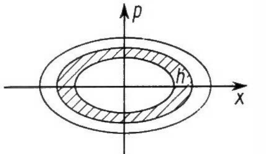


Fig. 6. Der Oszillator im Phasenraum

Als Phasenraumkurven des Oszillators kommen also nur solche Ellipsen (Fig. 6) in Frage, deren Halbachsen die Größe

$$a_n = \sqrt{2mE} = \sqrt{2mnh\nu} \quad \text{und} \quad b_n = \sqrt{\frac{E}{2\pi^2 m\nu^2}} = \sqrt{\frac{nh}{2\pi^2 m\nu}}$$

besitzen. Die Fläche einer solchen Ellipse ist

$$\oint p \,\mathrm{d}x = a_n b_n \pi = nh .$$

Der Phasenraum wird in Gebiete der Größe h eingeteilt.

N. BOHR verallgemeinerte dieses Ergebnis auf die Bewegung eines Elektrons im Atom: Es sollen nur solche Bewegungen erlaubt sein, für die die *Phasenintegralbedingung*

$$\boxed{\oint p \,\mathrm{d}q = nh} \tag{14}$$

erfüllt ist. Diese Bahnen seien stabil, das Atom soll auf ihnen nicht strahlen. Lediglich beim Übergang zwischen verschiedenen Bahnen werde ein EINSTEINsches Lichtquant emittiert oder absorbiert. Damit für das System (Atom + Photon) der Energiesatz gewährleistet bleibt, können nur solche Frequenzen ν ausgesandt werden, die der *Frequenzbedingung*

$$\nu = \frac{1}{h} (E_a - E_b) \tag{15}$$

genügen. Dabei sind E_a und E_b die Energien der Anfangs- und Endbahn. Als Folge der Diskretheit der Energien eines Elektrons im Atom sind also nur ganz bestimmte Frequenzen der emittierten Strahlung möglich, man gelangte zu einer Erklärung der *Linienspektren* (A. SOMMERFELD).

c) Das Wasserstoffatom

Als Beispiel zu den BOHRschen Postulaten betrachten wir ein Wasserstoffatom, und zwar nur den einfachsten Fall, in welchem das Elektron auf einer Kreisbahn vom Radius a den (fest angenommenen) Kern umlaufe. Die kinetische Energie beträgt

$$T = \frac{1}{2} m a^2 \dot{\varphi}^2$$

($\dot{\varphi}$ = Winkelgeschwindigkeit), also ist die zum Winkel φ gehörige Impulskoordinate

$$p_\varphi = m a^2 \dot{\varphi}.$$

Das Phasenintegral (14) ist über einen vollen Umlauf der Lagekoordinate zu erstrecken, also in unserem Fall von 0 bis 2π. Damit ergibt sich als Quantenbedingung

$$\int_0^{2\pi} p_\varphi \, \mathrm{d}\varphi = 2\pi m a^2 \dot{\varphi} = n h.$$

Weil Masse mal Normalbeschleunigung gleich der COULOMBschen Kraft ist, gilt andererseits

$$m a \dot{\varphi}^2 = \frac{q^2}{a^2}$$

(q = Ladung). Damit haben wir zwei Gleichungen für die beiden Unbekannten a und $\dot{\varphi}$. Lösen wir nach ihnen auf, so finden wir für den Radius der n-ten Bahn

$$a_n = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 m q^2} \tag{16}$$

und für die Winkelgeschwindigkeiten

$$\dot{\varphi}_n = \frac{1}{n^3} \frac{8\pi^3 m q^4}{h^3}. \tag{17}$$

Setzen wir die Werte von q, h, m ein, so erhalten wir für die kleinste Bahn

$$a_1 = 0{,}529 \cdot 10^{-8}\,\text{cm}, \tag{18}$$

eine Größe, die den gaskinetisch ermittelten Atomradien entspricht.

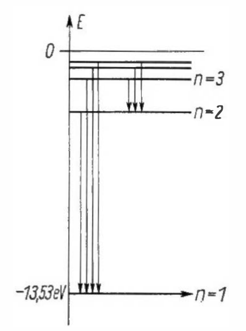


Fig. 7. Die Energieniveaus des H-Atoms

Für die Energie der im COULOMB-Potential gebundenen Elektronen

$$E = T + V = \frac{m}{2} a^2 \dot{\varphi}^2 - \frac{q^2}{a}$$

ergeben die Gl. (16) und (17) die diskreten Energiewerte (Fig. 7)

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m q^4}{h^2}. \tag{19}$$

Die beim Übergang zwischen zwei Zuständen des Atoms emittierten bzw. absorbierten Frequenzen berechnen sich nach dem zweiten BOHRschen Postulat (15) als Differenz dieser Energien. Man erhält in der Tat die Frequenzen der Spektrallinien, die beim Wasserstoffatom beobachtet werden (wenn man von Feinstrukturen absieht).

d) Kritik

Die BOHR-SOMMERFELDsche Theorie stellte für die Deutung der bis dahin unverstandenen Linienspektren einen großen Erfolg dar. Es zeigten sich jedoch bald auch ihre Grenzen: Sie lieferte z. B. quantisierte Drehimpulse, die mit der

Erfahrung nicht übereinstimmten, außerdem versagte sie bei der Behandlung von Mehrelektronenproblemen (z. B. dem He-Atom). Darüber hinaus sind natürlich auch die ad hoc eingeführten BOHRschen Postulate wenig befriedigend.

§ 4. Die Welleneigenschaften der Materie

a) Die de Broglieschen Materiewellen

Nachdem EINSTEIN der Wellentheorie des Lichtes das Konzept der Photonen als Teilchen gegenübergestellt hatte (§ 2), ging L. DE BROGLIE (1924) in umgekehrter Weise vor. Er entwickelte für die Elementarbausteine der Materie (Ruhmasse $m_0 \neq 0$), wie Elektronen und Protonen, von denen man bis dahin überzeugt war, daß sie Teilcheneigenschaften besäßen, in kühner Weise eine Wellentheorie: Zwischen der Frequenz und der Wellenlänge dieser *Materiewellen* soll derselbe Zusammenhang mit den Teilchengrößen Energie und Impuls bestehen, wie sie EINSTEIN für die Lichtquanten postulierte

$$\nu = \frac{E}{h} \quad \text{oder} \quad \boxed{\omega = \frac{E}{\hbar}} \tag{20}$$

und

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{oder} \quad \boxed{\mathfrak{k} = \frac{\mathfrak{p}}{\hbar}}. \tag{21}$$

Für Elektronen mit einer Energie von etwa 100 eV ergibt sich hieraus eine Wellenlänge von einigen Ångström. Beugung und Interferenz dieser Materiewellen sind daher an den mit diesem Abstand periodisch angeordneten Atomkernen eines Kristalls zu erwarten. In der Tat gelang DAVISSON und GERMER (1927) der Nachweis von Interferenzerscheinungen bei Reflexion von Elektronen an Nickeleinkristallen. Später wurden solche Interferenzen auch mit Protonen, Neutronen, α-Strahlen usw. nachgewiesen.

b) Die Schrödingersche Materiewellengleichung

Durch die DE BROGLIE-Beziehungen (20) und (21) wurden nur freie Materiewellen erfaßt. Wie verhalten sich aber die Materiewellen, wenn sie unter der Wirkung einer äußeren Kraft stehen? Diese Frage beantwortete 1926 E. SCHRÖDINGER, indem er eine Differentialgleichung für die raum-zeitliche Verteilung eines (nichtrelativistischen) Materiefeldes unter dem Einfluß eines Potentials aufstellte. Diese Gleichung bildet das Gegenstück zur MAXWELLschen Theorie der elektromagnetischen Strahlung.

Sucht man mittels dieser SCHRÖDINGER-Feldgleichung z. B. die Dichte der Elektronenwolke in einem Wasserstoffatom, so erlauben die Randbedingungen nur bestimmte Frequenzen und damit nach Gl. (20) nur bestimmte Energien. Die sich ergebenden Werte stimmten mit denen der BOHRschen Theorie [Gl. (19)] überein. Die SCHRÖDINGER-Theorie bedeutete gegenüber der ad hoc angenommenen Phasenintegralbedingung einen wesentlichen Fortschritt. Schließ-

lich war sie u. a. auch imstande, die oben erwähnten Schwierigkeiten in der BOHRschen Behandlung des Drehimpulses zu klären.

Wir werden in den Kap. 1.3 und 1.4 ausführlich auf die Herleitung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung und ihre Interpretation eingehen.

Bald nach dem Aufstellen der nichtrelativistischen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung wurde von SCHRÖDINGER, KLEIN, GORDON u. a. (1926) eine Materiefeldgleichung gefunden, die auch der Forderung nach relativistischer Invarianz entsprach. Diese Gleichung wurde jedoch dem mittlerweile gefundenen Elektronenspin (GOUDSMIT und UHLENBECK, 1925) nicht gerecht. Es ist das Verdienst P. A. M. DIRACS (1928), daß auch diese Lücke geschlossen wurde. Die DIRAC-Gleichung beschreibt ein relativistisches Materiefeld mit Spin 1/2.

Alle Versuche, in solchen klassischen Feldtheorien auch dem Teilchencharakter der Materie gerecht zu werden, sind jedoch gescheitert. Die Idee SCHRÖDINGERS, die etwa in einer WILSON-Kammer sich äußernde räumliche Lokalisierung eines Elektrons durch eine besonders große Stärke des Materiefeldes in einem Raum-Zeit-Punkt zu erfassen, läßt sich nicht realisieren. Auf diese und weitere Schwierigkeiten der klassischen Materiefeldtheorie kommen wir in Kap. 1.6 noch zu sprechen.

c) Die Dualität von Welle und Korpuskel

Die angeführten experimentellen Befunde über die Natur des Lichtes und der Materie zeigen eine Dualität der Erscheinungen des Mikrokosmos: Bei manchen Versuchen ergibt sich ein Verhalten, wie es Teilchen zeigen, in anderen wiederum ein solches, wie es einer Welle (oder allgemeiner einem Feld) zukommt. Die zugehörigen Theorien seien, durch die Namen ihrer Entdecker charakterisiert, zusammengestellt:

	Teilchen	Welle
Materie	NEWTON	DE BROGLIE, SCHRÖDINGER, ...
Licht	EINSTEIN	MAXWELL

Das Teilchenbild ist ebensowenig wie das Wellenbild für sich allein imstande, alle physikalischen Phänomene zu beschreiben.

§ 5. Einige vorläufige Bemerkungen zur Bewältigung der Dualität durch die Quantentheorie

a) Die Heisenbergsche Unschärferelation

Die Frage, innerhalb welcher Grenzen die klassischen Vorstellungen von Teilchen und Welle miteinander verträglich sind, wird durch die *Unschärferelationen* beantwortet, die W. HEISENBERG (1927) aufstellte.

Als einfaches, aber besonders instruktives Beispiel betrachten wir den Durchgang von Licht durch einen Spalt[1]) (Fig. 8) der Breite b. Das monochromatische Licht falle senkrecht auf den Spalt ein; es hat daher (vor dem Spalt!) einen Impuls in der x-Richtung, dessen Größe nach der EINSTEINschen Beziehung gegeben ist durch $p = \frac{h}{\lambda}$.

Nun wollen wir die Verhältnisse *hinter* dem Spalt betrachten. Weil dieser die Breite b besitzt, ist die Ortsunschärfe in der y-Richtung

$$\Delta y = b. \tag{22}$$

Die Impulsunschärfe in y-Richtung kommt durch die Beugung des Strahls am Spalt zustande

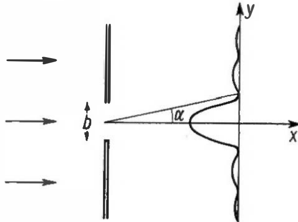


Fig. 8. Zur Unschärferelation

$$\Delta p_y = p \sin \alpha \approx p\alpha.$$

Den Winkel α kann man dadurch abschätzen, daß man etwa die Richtung des ersten Minimums der Beugungsfigur, $\alpha = \frac{\lambda}{b}$, einsetzt

$$\Delta p_y \approx \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{b} = \frac{h}{b}. \tag{23}$$

Multiplizieren wir die beiden Gleichungen (22) und (23) miteinander, so erhalten wir

$$\boxed{\Delta y \cdot \Delta p_y \approx h}\,, \tag{24}$$

d. h., machen wir — um eine genauere Ortsmessung zu erhalten — die Öffnung kleiner, so ist damit automatisch eine Vergrößerung der Unschärfe des Impulses verknüpft. Umgekehrt ist die Richtungsabweichung und damit die Impulsunschärfe um so kleiner, je weniger wir den Strahl durch die Öffnung begrenzen. Für $\Delta y = b \to \infty$ (kein Spalt!) haben wir eine unendlich ausgedehnte ebene Welle vor uns: der Ort y ist völlig unbestimmt, aber der Impuls in y-Richtung ist genau bekannt, nämlich $p_y = 0$.

Wir wollen uns noch einmal vergegenwärtigen, wie wir zur Unschärferelation (24) gelangt sind: Durch Zusammenwirken der Wellenvorstellung und der EINSTEINschen Beziehungen erhielten wir eine Aussage über die nicht gleichzeitige, beliebig scharfe Meßbarkeit der der Teilchenvorstellung entstammenden Begriffe.

Unschärferelationen lassen sich auch zwischen anderen Observablen ableiten, etwa zwischen den Größen des Wellenbildes. Man kann z. B. zeigen, daß die

[1]) Die Überlegung gilt im Prinzip auch für Materiewellen. An Stelle eines Spaltes muß man in praxi natürlich dann ein Kristallgitter verwenden.

x-Komponente des elektrischen Feldes $\mathfrak{E}$ nicht gleichzeitig mit der y-Komponente des Magnetfeldes $\mathfrak{B}$ beliebig genau gemessen werden kann.

Die Unschärferelationen sind also ein Ausdruck für die wechselseitige Einschränkung des Teilchen- und Wellenbildes. Widersprüche zwischen beiden Bildern kommen nicht zustande, wenn man sich im Rahmen der Unschärferelationen bewegt. Das Wirkungsquantum ist das Maß für diese gegenseitige Einschränkung.

b) Die Entwicklung der Quantentheorie

Der Erfolg der Quantentheorie beruht darauf, daß sie das Problem der Dualität bewältigt. Die Unschärferelationen zeigen, daß dazu eine andere mathematische Beschreibung der physikalischen Größen (Observablen) als in der klassischen Physik nötig ist.[1]) Auch der Begriff der Bahn einer Bewegung — das Ziel jeder klassisch-mechanischen Untersuchung — muß seinen Sinn verlieren, wenn man Ort und Impuls nicht mehr gleichzeitig angeben kann.

HEISENBERG hat 1925 — also schon vor Entdeckung der Unschärferelation — in seiner *Matrizenmechanik* den ersten Schritt zu einer solchen mathematischen Revision der theoretischen Physik getan. Er ging davon aus, eine Theorie zu entwickeln, in der unmittelbar die beobachtbaren Frequenzen der emittierten Strahlung vorkommen, die sich in Form einer Matrix

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h}(E_n - E_m)$$

schreiben lassen. Dies führte dazu, daß auch der Ort des strahlenden, atomaren Dipols durch eine Matrix $x_{nm}(t)$ und nicht durch eine Zahl $x(t)$ (wie in der klassischen Mechanik) darzustellen ist. Durch Ausdehnung dieses Konzepts auf alle übrigen physikalischen Größen entstand die Matrizenmechanik, in der HEISENBERG zwischen den Matrizen solche Relationen wählte, die — im Rahmen der Matrizenrechnung — einen möglichst engen Zusammenhang mit den entsprechenden Relationen der klassischen Mechanik haben (Kap. 3.2).

Der weitere Ausbau der Quantentheorie erfolgte in den zwanziger Jahren in einer rasch aufeinander folgenden Reihe von Arbeiten von BOHR, HEISENBERG, BORN, JORDAN, DIRAC, VON NEUMANN u. a. In ihnen wurde einerseits die statistische Interpretation der Quantentheorie (M. BORN) gegeben (Kap. 3.3) und andererseits eine Formulierung erarbeitet, in der von den Matrizen auf Operatoren in einem unitären Raum übergegangen wurde.

Schließlich wurde die Quantentheorie auf zahlreiche Probleme der Atom-, Kern- und Festkörperphysik angewendet, und ihre Ergebnisse wurden in unzähligen Experimenten bestätigt.

---

[1]) Auch die BOHR-SOMMERFELDsche Theorie gibt einen Hinweis auf eine Revision der klassischen Behandlungsweise, da in ihr ein System nicht mehr jeden Phasenpunkt (x, p) einnehmen kann.

Die Vereinigung von Quantentheorie und (spezieller) Relativitätstheorie in der Quantenelektrodynamik und relativistischen Quantenfeldtheorie brachte einerseits viele wichtige Resultate, die mit den Experimenten übereinstimmen, andererseits bestehen jedoch auch heute noch manche Schwierigkeiten, die zeigen, daß das Problem einer solchen Vereinigung vermutlich noch nicht seine endgültige Lösung erfahren hat. Der Leser sei bezüglich dieser Fragen auf ein Lehrbuch der relativistischen Quantenfeldtheorie verwiesen. In dem vorliegenden Buch beschränken wir uns auf die nichtrelativistische Theorie, da man in ihr bereits alle wesentlichen Züge der Quantentheorie erkennen kann.

Bevor wir jedoch zur Besprechung der Quantentheorie (3. und 4. Teil) kommen, wollen wir zunächst die klassische Theorie der Materie eingehender analysieren: Nach einem kurzen Überblick über die klassische Mechanik erfolgt eine ausführliche Darstellung des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes.

Zweites Kapitel

Das klassische Teilchenbild

In diesem Kapitel soll ein kurzer Abriß der klassischen, nichtrelativistischen Mechanik gegeben werden. Es wird dabei vorausgesetzt, daß der Leser mit den wichtigsten Begriffen der Mechanik bereits vertraut ist.

§ 1. Das Wirkungsprinzip und die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen

Wir betrachten ein mechanisches System, das durch (generalisierte) Lagekoordinaten $q_1, \ldots, q_f$ im Konfigurationsraum gekennzeichnet wird. f ist die Anzahl der Freiheitsgrade; bei N Teilchen, die keinen Nebenbedingungen unterworfen sind, ist $f = 3N$.

Die Bewegung des Systems wird durch seine LAGRANGE-Funktion

$$L(q_1, \ldots, q_f, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_f, t) \tag{1}$$

bestimmt, die eine Funktion der Lagekoordinaten q_i und ihrer zeitlichen Ableitungen $\dot{q}_i$ ist. Außerdem kann L noch von der Zeit t abhängen, wenn das System äußeren, zeitabhängigen Einwirkungen unterworfen ist. Diese *explizite* Zeitabhängigkeit ist nicht mit der Zeitabhängigkeit $L(t)$ zu verwechseln, die sich ergibt, wenn man die Bewegung $q_i(t)$, $\dot{q}_i(t)$ in (1) einsetzt.

Das Bewegungsgesetz ergibt sich aus dem *Wirkungsprinzip* (HAMILTON): Soll sich das System zu zwei Zeiten t^0 und t^1 in den Lagen $q_1^0, \ldots, q_f^0$ und $q_1^1, \ldots, q_f^1$ befinden, so betrachte man für alle Bahnen zwischen den Punkten P^0 und P^1 (Fig. 9) das Wirkungsintegral

$$J = \int_{P^0}^{P^1} L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)\, \mathrm{d}t. \tag{2}$$

Jene Bahn, für die dieses Integral ein Extremum wird, stellt die tatsächliche Bewegung des Systems dar. Ihre Differentialgleichungen (LAGRANGEsche Gleichungen) sollen im folgenden aus diesem Wirkungsprinzip hergeleitet werden.

Wir bezeichnen jetzt mit $q_i(t)$ $(i = 1, \ldots, f)$ gerade diese Bahn und irgendeinen Punkt auf ihr mit P. Ein Punkt P' der benachbarten Bahnen (längs denen also das Integral J nicht extremal ist und die also physikalisch nicht durchlaufen werden) möge aus P durch infinitesimale Variationen δq_i und δt hervorgehen[1]),

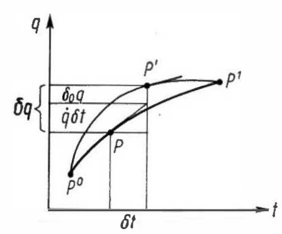


Fig. 9. Zum Wirkungsprinzip

$$\begin{array}{c|c} P & P' \\ \hline q_i & q_i + \delta q_i \\ \dot{q}_i & \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i \\ t & t + \delta t\ . \end{array} \tag{3}$$

Weil die Richtung der Bahn im Punkt P' durch

$$\begin{aligned} \dot{q}_i(P') &= \frac{\mathrm{d}(q_i + \delta q_i)}{\mathrm{d}(t + \delta t)} = \frac{\mathrm{d}(q_i + \delta q_i)}{\mathrm{d}t} \frac{1}{\mathrm{d}(t + \delta t)/\mathrm{d}t} \\ &= \left(\dot{q}_i + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta q_i\right)\left(1 - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta t\right) \\ &= \dot{q}_i + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta q_i - \dot{q}_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta t \end{aligned}$$

gegeben ist, findet man für die Variation $\delta \dot{q}_i = \dot{q}_i(P') - \dot{q}_i(P)$ die Beziehung

$$\boxed{\delta \dot{q}_i = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta q_i - \dot{q}_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta t}\ . \tag{4}$$

Für $\delta t = 0$ ist die Variation mit der zeitlichen Differentiation vertauschbar.

Die Variation δJ des Wirkungsintegrals muß nach dem Wirkungsprinzip auf der physikalisch realisierten Bahn verschwinden,

$$\delta J = \int_{P^0}^{P^1} \delta(L\,\mathrm{d}t) = 0\,. \tag{5}$$

Für den Integranden

$$\delta(L\,\mathrm{d}t) = \delta L \cdot \mathrm{d}t + L \cdot \delta \mathrm{d}t \tag{6}$$

erhält man bei Berücksichtigung von

$$\delta L = \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta \dot{q}_i\right) + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \delta t\,,$$

[1]) Für die bloße Herleitung der LAGRANGEschen Gleichungen aus dem Wirkungsprinzip kann man auf die Variation der Zeit verzichten. Wegen der weitergehenden Überlegungen der §§ 2 und 3 ist es jedoch zweckmäßig, die unabhängige Variable t ebenfalls zu variieren.

sowie von Gl. (4) und $\delta \mathrm{d}t = \mathrm{d}\delta t$ (t ist unabhängige Variable!)

$$\delta(L\,\mathrm{d}t) = \sum \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\delta q_i\right)\mathrm{d}t + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\delta t\cdot\mathrm{d}t + \left(L - \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right)\mathrm{d}\delta t, \tag{7}$$

wofür man auch schreiben kann

$$\begin{aligned}\delta(L\,\mathrm{d}t) = {} & \sum \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i\cdot\mathrm{d}t \\ & + \left[\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(L - \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right)\right]\delta t\cdot\mathrm{d}t \\ & + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\delta q_i + \left(L - \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right)\delta t\right]\mathrm{d}t.\end{aligned} \tag{8}$$

Führt man in der zweiten Zeile die Differentiation $\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}$ aus, so gelangt man zur Beziehung

$$\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(L - \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right) = -\sum \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\dot{q}_i. \tag{9}$$

Für die Variation des Wirkungsintegrals ergibt sich damit

$$\boxed{\begin{aligned}\delta J = {} & \int_{P^0}^{P^1} \sum \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)(\delta q_i - \dot{q}_i\,\delta t)\,\mathrm{d}t \\ & + \left\{L\,\delta t + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,(\delta q_i - \dot{q}_i\,\delta t)\right\}\Bigg|_{P^0}^{P^1}\end{aligned}}\,, \tag{10}$$

wobei die Integration über die dritte Zeile von Gl. (8) auf die Werte in den Randpunkten P^0 und P^1 führte. Die Bedeutung der Größe

$$\delta q_i - \dot{q}_i\,\delta t = \delta_0 q_i \tag{11}$$

ist aus Fig. 9 ersichtlich.

Da die Variationen δq_i und δt in den Randpunkten P^0 und P^1 Null sind, verschwindet die zweite Zeile von Gl. (10). Das verbleibende Integral muß nach dem Wirkungsprinzip (5) für beliebige Variationen δq_i und δt Null sein. Dies ist nur möglich, wenn gilt

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}}\,. \tag{12}$$

Diese LAGRANGE*schen Bewegungsgleichungen* sind f Differentialgleichungen für die Funktionen $q_i(t)$. Hängt die LAGRANGE-Funktion von einer Variablen q_k *nicht* ab („zyklische Variable"), so erhält man

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \mathrm{const}, \tag{13}$$

d. h. eine Erhaltungsgröße bei der Bewegung (vgl. auch § 3). Als Folge der LAGRANGEschen Gleichungen ergibt sich aus Gl. (9)

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(L - \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right) = \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}}\,. \tag{14}$$

Ist also die LAGRANGE-Funktion nicht explizit zeitabhängig, so ist die Größe

$$E = \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i - L \tag{15}$$

bei der Bewegung zeitlich konstant (*Energiesatz*).

Beispiel: Für ein Teilchen unter dem Einfluß eines Potentials $V(\mathfrak{r}, t)$ lautet die LAGRANGE-Funktion

$$L(\mathfrak{r}, \dot{\mathfrak{r}}, t) = \frac{m}{2}\,\dot{\mathfrak{r}}^2 - V(\mathfrak{r}, t)\,. \tag{16}$$

Wegen

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = -\frac{\partial V}{\partial x_i}\,, \qquad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i = p_i \text{ (Impuls)}$$

führen die LAGRANGEschen Gleichungen (12) zum NEWTONschen Gesetz

$$m\ddot{\mathfrak{r}} = -\operatorname{grad} V = \mathfrak{K}(\mathfrak{r}, t)\,.$$

Die Energie E ergibt sich nach Gl. (15) als Summe von kinetischer und potentieller Energie

$$E = \frac{m}{2}\,\dot{\mathfrak{r}}^2 + V(\mathfrak{r}, t)\,.$$

Ihre totale zeitliche Veränderung ist nach Gl. (14)

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial V}{\partial t}\,.$$

Aufg. 1: Man schreibe die LAGRANGEschen Gleichungen als Differentialgleichungen für $q_i(t)$ aus.

Aufg. 2: Wie lautet für ein Teilchen unter dem Einfluß eines Potentials die zeitliche Veränderung von $\mathfrak{r}\mathfrak{p}$ (*Virialsatz*)? Was ergibt sich, wenn V eine homogene Funktion des Ortes vom Grad α ist?

Aufg. 3: Man zeige, daß die LAGRANGEschen Gleichungen identisch erfüllt sind, wenn L die totale Ableitung einer Funktion $\Omega(q_1, \ldots, t)$ ist.

§ 2. Die Wirkungsfunktion

Da die LAGRANGEschen Gleichungen Differentialgleichungen zweiter Ordnung sind, hängen ihre Lösungen von $2f$ Integrationskonstanten ab. Wir wollen diese durch die Koordinaten der Anfangs- und Endpunkte $P^0(q_1^0, \ldots, q_f^0, t^0)$ und $P^1(q_1^1, \ldots, q_f^1, t^1)$ ausdrücken. Dann lauten die Lösungen, die wir im folgenden als

bekannt annehmen,

$$q_i = q_i(t, P^1, P^0), \quad \dot{q}_i = \dot{q}_i(t, P^1, P^0). \tag{17}$$

Setzt man diese Lösungen in die LAGRANGE-Funktion (1) ein, so wird sie eine Funktion der Zeit (vermöge der Bewegung!) und der Koordinaten der Randpunkte P^1 und P^0,

$$L[q_1(t, P^1, P^0), \ldots, \dot{q}_1(t, P^1, P^0), \ldots, t] = L(t, P^1, P^0). \tag{18}$$

Berechnet man damit das (extremale!) Wirkungsintegral

$$\boxed{J_{\text{extr}} = \int_{t^0}^{t^1} L(t, P^1, P^0)\,\mathrm{d}t \equiv S(P^1, P^0)}, \tag{19}$$

so erhält man eine Funktion S der Randpunkte P^1 und P^0,

$$S(q_1^1, \ldots, t^1;\ q_1^0, \ldots, t^0), \tag{20}$$

die man *Wirkungsfunktion* oder HAMILTONS *Prinzipalfunktion* nennt.

Die Veränderung von S mit den Randpunkten wird durch die zweite Zeile von Gl. (10) bestimmt: Differenziert man S nach den Koordinaten des Punktes P^1, so gilt

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial q_i^1} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\bigg|_1, \quad \frac{\partial S}{\partial t^1} = -\left(\sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L\right)\bigg|_1}. \tag{21}$$

Der Index 1 auf den rechten Seiten bedeutet, daß die Funktionen an der Stelle $t^1, q_i^1, \dot{q}_i^1 = \dot{q}_i^1(t^1, P^1, P^0)$ zu nehmen sind. Für die Veränderung von S mit den Koordinaten des Punktes P^0 gelten entsprechende Gleichungen [sie unterscheiden sich von den Gl. (21) um ein zusätzliches Minuszeichen].

Wir werden nun noch den Spezialfall untersuchen, in dem die *Energie des Systems konstant* ist,

$$E = E(P^1, P^0). \tag{22}$$

In Gl. (19) ersetzen wir die LAGRANGE-Funktion entsprechend Gl. (15) und erhalten

$$S(P^1, P^0) = \int_{P^0}^{P^1} \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\mathrm{d}q_i - E \cdot (t^1 - t^0). \tag{23}$$

Die Größen $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)$ werden bei Einsetzen der Lösungen (17) zu Funktionen $p_i = p_i(t, P^1, P^0)$. Die in ihnen auftretenden Zeiten [1] t, t^0 und t^1 lassen sich jedoch eliminieren, wenn man diese aus den Gl. (17_1) und (22) berechnet. Man erhält damit

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_i, q_1^1, \ldots, q_1^0, \ldots, E). \tag{24}$$

[1]) In die Lösungen gehen in diesem Fall nur die Zeit*differenzen* $t - t^0$ und $t^1 - t^0$ ein (vgl. 1.2 § 3b).

Das Integral in Gl. (23) wird daher eine Funktion der Lagekoordinaten $q_1^1, \ldots, q_1^0, \ldots$ und der Energie E,

$$W(q_1^1, \ldots, q_1^0, \ldots, E) = \int_{q_0}^{q^1} \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \, \mathrm{d}q_i, \tag{25}$$

welche man *charakteristische Funktion* nennt. Bei Energieerhaltung kann also die Wirkungsfunktion S in eine Funktion der Lagekoordinaten und eine lineare Funktion der Zeit aufgespalten werden,

$$\boxed{S(q_1^1, \ldots, t^1, q_1^0, \ldots, t^0) = W(q_1^1, \ldots, q_1^0, \ldots, E) - E \cdot (t^1 - t^0)}\,. \tag{26}$$

Die Ausdrücke (21) für die Differentialquotienten von S lassen sich auf solche von W umschreiben: Einerseits gilt nach Gl. (21_2)

$$\frac{\partial S}{\partial t^1} = -E,$$

und andererseits erhält man durch Differentiation von Gl. (26) — wenn man berücksichtigt, daß E über Gl. (22) von t^1 abhängt —

$$\frac{\partial S}{\partial t^1} = \left[\frac{\partial W}{\partial E} - (t^1 - t^0)\right] \frac{\partial E}{\partial t^1} - E,$$

woraus folgt

$$\frac{\partial W}{\partial E} = t^1 - t^0.$$

Für die Ableitungen nach den Koordinaten q_i^1 ergeben die Gleichungen (26) und (21)

$$\frac{\partial S}{\partial q_i^1} = \frac{\partial W}{\partial q_i^1} + \frac{\partial W}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial q_i^1} - \frac{\partial E}{\partial q_i^1}(t^1 - t^0) = \frac{\partial W}{\partial q_i^1} = \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right|_1.$$

Die charakteristische Funktion W erfüllt also die Beziehungen

$$\boxed{\frac{\partial W}{\partial q_i^1} = \left.\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right|_1, \quad \frac{\partial W}{\partial E} = t^1 - t^0}\,. \tag{27}$$

Betrachtet man die charakteristische Funktion W bei *festem* Anfangspunkt $(q_1^0, \ldots, q_f^0)$ und *fester* Energie E *als Funktion des Endpunktes* $(q_1^1, \ldots, q_f^1)$ — den oberen Index 1 lassen wir künftig weg —, so werden durch

$$W(q_1, \ldots, q_f) = \text{const} \tag{28}$$

im Konfigurationsraum *Hyperflächen* definiert. Ihr Gradient ist durch Gl. (27_1) gegeben. Ein Wert $S = \text{const}$ der Wirkungsfunktion wandert nach Gl. (26) im Laufe der Zeit von einer W-Fläche zur anderen.

Für *ein* Teilchen ist

$$W(\mathfrak{r}) = \text{const} \tag{28a}$$

eine Fläche im Ortsraum. Steht das Teilchen unter dem Einfluß eines Potentials $V(\mathfrak{r})$, so ist nach Gl. (27_1) u. (16) der Gradient der W-Flächen gerade der Teilchenimpuls

$$\operatorname{grad} W = m\dot{\mathfrak{r}} = \mathfrak{p}. \tag{29}$$

Die Bewegung des Teilchens erfolgt also (in diesem Fall) senkrecht zu den W-Flächen (Fig. 10). Durch Quadrieren von Gl. (29) ergibt sich

$$(\operatorname{grad} W)^2 = 2m\,[E - V(\mathfrak{r})]. \tag{30}$$

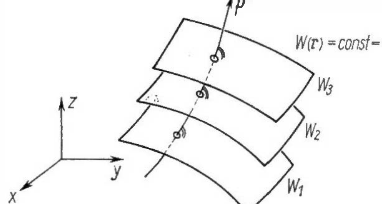


Fig. 10. Bahn eines Teilchens als Orthogonaltrajektorie auf den W-Flächen

Die Geschwindigkeit, mit der ein *fester* Wert der Wirkungsfunktion S im Laufe der Zeit von einer W-Fläche zur anderen wandert, erhalten wir, indem wir aus Gl. (26) dS bestimmen und null setzen

$$\mathrm{d}S = \operatorname{grad} W\,\mathrm{d}\mathfrak{r} - E\,\mathrm{d}t = |\operatorname{grad} W|\,\mathrm{d}n - E\,\mathrm{d}t = 0.$$

Die *Ausbreitungsgeschwindigkeit* von S in Richtung der Normalen der W-Flächen ist also

$$\boxed{v_S = \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \frac{E}{|\operatorname{grad} W|} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V(\mathfrak{r}))}}}\,.\,^{1)} \tag{31}$$

Sie ist verschieden von der Teilchengeschwindigkeit

$$\boxed{v_T = \sqrt{\frac{2}{m}\,(E - V(\mathfrak{r}))}}\,. \tag{32}$$

Aufg. 4: Man führe die im § 2 angestellten Überlegungen am Beispiel eines freien Teilchens explizit durch.

§ 3. Symmetrie und Erhaltungssätze [2]

a) Das Theorem von E. Noether

Durch eine Transformation

$$t' = t'(t), \quad q_i' = q_i'(q_1, \ldots, q_f, t) \tag{33}$$

werde zu neuen Variablen t' und q_i' übergegangen. Die Transformation der Ableitungen ist dadurch bereits festgelegt. Umgekehrt erhält man die alten Variablen t und q_i als Funktion der neuen durch Auflösung

$$t = t(t'), \quad q_i = q_i(q_1', \ldots, q_f', t'). \tag{33a}$$

[1] Die Geschwindigkeit v_S hängt von der Wahl des Energie-Nullpunktes ab. Während aus Gl. (31) für ein freies Teilchen $v_S = v_T/2$ folgt, ergibt sich in relativistischer Behandlung aus der Energie $E = mc^2$, in der die Ruhenergie m_0c^2 mitgerechnet ist, $v_S^{\mathrm{rel}} = E/p = c^2/v_T$.

[2] Dieser Paragraph kann beim ersten Studium überschlagen werden.

Setzt man diese Transformation in $L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)$ ein, so erhält man

$$L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)\,\mathrm{d}t = L'(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t')\,\mathrm{d}t', \quad \left(\dot{q}_i' = \frac{\mathrm{d}q_i'}{\mathrm{d}t'}\right). \tag{34}$$

Diese Gleichung definiert eine *neue* LAGRANGE-Funktion L' in den neuen Variablen.

Wir wollen die Frage untersuchen, wann die Bewegungsgleichungen in den neuen Variablen dieselbe Gestalt haben wie in den alten Variablen (*Forminvarianz der Bewegungsgleichungen*). Eine solche *Symmetrietransformation* liegt vor, wenn die neue LAGRANGE-Funktion $L'(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t')$ mit der alten LAGRANGE-Funktion in den neuen Variablen, $L(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t')$, übereinstimmt oder sich um den totalen Differentialquotienten einer Funktion $\Omega(q_1', \ldots, t')$ (mit der Dimension einer Wirkung) unterscheidet (vgl. Aufg. 3),

$$L'(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t') = L(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t') + \frac{\mathrm{d}\Omega(q_1', \ldots, t')}{\mathrm{d}t'}. \tag{35}$$

Zusammen mit Gl. (34) ergibt dies für den Integranden des Wirkungsintegrals die Symmetriebedingung

$$\boxed{L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)\;\mathrm{d}t = L(q_1', \ldots, \dot{q}_1', \ldots, t')\,\mathrm{d}t' + \mathrm{d}\Omega(q_1', \ldots, t')}\,. \tag{36}$$

Bilden die Symmetrietransformationen eine *kontinuierliche Gruppe*[1]), so genügt es, die *infinitesimalen Transformationen* zu untersuchen

$$\begin{aligned} t' &= t + \mathfrak{d}t, \\ q_i' &= q_i + \mathfrak{d}q_i, \\ \dot{q}_i' &= \dot{q}_i + \mathfrak{d}\dot{q}_i. \end{aligned} \tag{37}$$

Zur Unterscheidung von dem in § 1 eingeführten Variationssymbol δ kennzeichnen wir jetzt die infinitesimale Symmetrietransformation mit $\mathfrak{d}$[2]). Dabei können i. a. die Größen $\mathfrak{d}t$ von t, $\mathfrak{d}q_i$ von allen q_i, t und $\mathfrak{d}\dot{q}_i$ von allen q_i, $\dot{q}_i$, t abhängen. Da die formalen Umformungen (4) und (6) bis (8) unabhängig von der Bedeutung von δ sind, gelten diese Gleichungen auch in den Veränderungen $\mathfrak{d}$, also z. B.

$$\mathfrak{d}\dot{q}_i = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathfrak{d}q_i - \dot{q}_i\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathfrak{d}t$$

und

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{d}(L\,\mathrm{d}t) = \sum\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,\mathfrak{d}q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathfrak{d}q_i\right)\mathrm{d}t + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\mathfrak{d}t\cdot\mathrm{d}t \\ + \left(L - \sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\dot{q}_i\right)\frac{\mathrm{d}\mathfrak{d}t}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t. \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

---

[1]) Die Transformationen sollen von einem oder mehreren Parametern kontinuierlich abhängen (vgl. Kap. 5.4). Die *infinitesimalen* Transformationen unterscheiden sich in den Parametern nur infinitesimal von der identischen Transformation, bei der überhaupt keine Veränderung stattfindet. Eine endliche kontinuierliche Transformation läßt sich durch wiederholte Ausführung von infinitesimalen Transformationen aufbauen.

[2]) Dies ist natürlich kein Vektorsymbol!

Für eine infinitesimale Transformation lautet die Gl. (36)

$$L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)\,\mathrm{d}t = L(q_1 + \mathfrak{d}q_1, \ldots, \dot{q}_1 + \mathfrak{d}\dot{q}_1, \ldots, t + \mathfrak{d}t)\,\mathrm{d}(t + \mathfrak{d}t) + \mathrm{d}\mathfrak{d}\Omega(q_1, \ldots, t),\ ^{1)}$$

oder

$$\mathfrak{d}(L\,\mathrm{d}t) + \mathrm{d}\mathfrak{d}\Omega = 0. \tag{39}$$

Mit Gl. (38_2) ergibt sich hieraus

$$\boxed{\sum\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\,\mathfrak{d}q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathfrak{d}q_i\right) + \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\mathfrak{d}t + \left(L - \sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)\frac{\mathrm{d}\mathfrak{d}t}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}\mathfrak{d}\Omega}{\mathrm{d}t}}\,, \tag{40}$$

die Bedingung dafür, daß ein durch L beschriebenes mechanisches System die infinitesimale Symmetrietransformation (37) erlaubt. Um festzustellen, ob die zu einer bestimmten LAGRANGE-Funktion gehörigen Bewegungsgleichungen forminvariant gegenüber einer Transformation (37) sind, hat man also zu untersuchen, ob die linke Seite von Gl. (40) verschwindet oder wenigstens als totales Differential geschrieben werden kann. Damit wird die Funktion $\mathfrak{d}\Omega(q_1, \ldots, t)$ bestimmt. Ist insbesondere $\mathfrak{d}\Omega = 0$ und $\mathfrak{d}\mathrm{d}t = \mathrm{d}\mathfrak{d}t = 0$, so gilt $\mathfrak{d}L = 0$, d. h. die LAGRANGE-Funktion ist dann selbst invariant gegenüber der Transformation.

Ist die Bedingung (40) erfüllt, so folgt bei Berücksichtigung der Bewegungsgleichungen (12) und (14), daß die totale Ableitung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\mathfrak{d}q_i + \left(L - \sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)\mathfrak{d}t + \mathfrak{d}\Omega\right] = 0$$

verschwindet, d. h., die Größe

$$\boxed{\sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\mathfrak{d}q_i + \left(L - \sum\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)\mathfrak{d}t + \mathfrak{d}\Omega = \mathrm{const}} \tag{41}$$

ist vermöge der Bewegung konstant (*Integral der Bewegung*). *Die (kontinuierliche) Symmetriegruppe hat einen Erhaltungssatz zur Folge* (E. NOETHER). Die durch bestimmte Symmetrien gegebenen physikalischen Größen (41) kann man zur *Definition der Observablen* verwenden.

b) Beispiele

1. *Translation in der Zeit (Energieerhaltung):* Ein mechanisches System ist invariant gegen eine infinitesimale Translation der Zeit

$$\mathfrak{d}t = \mathrm{const}, \quad \mathfrak{d}q_i = 0, \quad \mathfrak{d}\Omega = 0,^{2)} \tag{42}$$

---

[1]) Weil bei einer infinitesimalen Transformation $\mathfrak{d}\Omega$ bereits differentiell ist, müssen im Argument in erster Ordnung die Veränderungen $\mathfrak{d}q_i$ und $\mathfrak{d}t$ weggelassen werden.

[2]) $\mathfrak{d}\Omega = 0$ bedeutet eine zusätzliche Einschränkung der durch die Symmetrietransformation erlaubten LAGRANGE-Funktionen. Für die Forminvarianz der Bewegungsgleichungen ist eine solche Einschränkung jedoch nicht notwendig, z. B. ergibt sich für die Translationsinvarianz im Ortsraum [vgl Gl. (43)] mit $\mathfrak{d}\Omega \neq 0$, daß das NEWTONsche Bewegungsgesetz gegen Translationen forminvariant ist, wenn eine ortsunabhängige, aber zeitabhängige Kraft $\mathfrak{K}(t)$ wirkt.

wenn nach Gl. (40)

$$\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\text{ex}} = 0 \tag{42a}$$

erfüllt ist. In diesem Fall liefert die Gl. (41)

$$\sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = E = \text{const}; \tag{42b}$$

es gilt Energieerhaltung, was bereits auch direkt in Gl. (15) gefunden wurde.

2. *Translation im Ortsraum* (*Impulserhaltung*), z. B. für ein Teilchen längs der x_3-Achse:

$$\delta x_3 = \text{const}, \quad \delta x_1 = \delta x_2 = 0, \quad \delta t = 0, \quad \delta \Omega = 0. \tag{43}$$

Bei dieser Invarianz muß nach Gl. (40) gelten

$$\frac{\partial L}{\partial x_3} = 0. \tag{43a}$$

Hieraus folgt nach Gl. (41)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_3} = p_3 = \text{const} \tag{43b}$$

(Impulserhaltung [vgl. auch Gl. (13)]). Eine (ortsabhängige) Kraft ist also der Ausdruck dafür, daß die Translationsinvarianz zerstört ist.

3. *Drehungen im Ortsraum* (*Drehimpulserhaltung*), z. B. für ein Teilchen um die x_3-Achse:

$$\delta \varphi_3 = \text{const}, \quad \delta \varphi_1 = \delta \varphi_2 = 0, \quad \delta t = 0, \quad \delta \Omega = 0. \tag{44}$$

Die Invarianzbedingung lautet

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi_3} = 0. \tag{44a}$$

Sie zieht die Erhaltung von

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}_3} = l_3 = \text{const} \tag{44b}$$

nach sich (Drehimpulserhaltung). Ein mechanisches Moment bedeutet eine Verletzung der Drehinvarianz.

4. GALILEI-*Transformation* (*Schwerpunkterhaltung*), z. B. für ein Teilchen längs der x_3-Achse:

$$\delta x_3 = t\,\delta v_3, \quad \delta v_3 = \text{const}, \quad \delta x_1 = \delta x_2 = 0, \quad \delta t = 0. \tag{45}$$

Gl. (40) ergibt die Bedingungsgleichung

$$\left(\frac{\partial L}{\partial x_3} t + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_3}\right) \delta v_3 = - \frac{d\delta\Omega}{dt}. \tag{45a}$$

Als Erhaltungsgröße liefert Gl. (41)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_3} t\, \delta v_3 + \delta \Omega = \text{const.} \tag{45b}$$

Fordert man neben der GALILEI-Invarianz noch zusätzlich Invarianz gegen Translationen im Ortsraum [Gl. (43a)], so verschwindet in Gl. (45a) der erste Term. Mit $p_3 = m\dot{x}_3$ ergibt sich $\delta\Omega = -mx_3\,\delta v_3$, und der Erhaltungssatz (45 b) nimmt die Form

$$-\frac{p_3}{m}t + x_3(t) = \text{const} = x_3(0) \tag{45c}$$

an. Bei Erweiterung auf ein System mit mehreren Massenpunkten wird Gl. (45 c) zum *Schwerpunktsatz.*

In der ***relativistischen Mechanik*** führt die Translation im Raum-Zeit-Kontinuum (Zusammenfassung von 1. und 2.) zum Energie-Impuls-Vektor und die LORENTZ-Transformation als vierdimensionale Drehung (relativistische Erweiterung von 3. und 4.) zur Vereinigung von Drehimpuls- und Schwerpunktsatz.

Aufg. 5: Welche Bedingung müßte die LAGRANGE-Funktion eines Teilchens erfüllen, wenn sie invariant gegenüber einer Dehnung des Raumes sein sollte? Wie lautet die zugehörige Erhaltungsgröße?

§ 4. Die Hamiltonsche Formulierung der Mechanik

a) Die Hamiltonschen Gleichungen

Während in der LAGRANGEschen Formulierung der Mechanik die Kennzeichnung des Zustandes eines Systems durch (generalisierte) Lagekoordinaten und Geschwindigkeiten erfolgte, verwendet man in der HAMILTONschen Theorie (generalisierte) Lagekoordinaten und kanonische Impulse. Man definiert diese durch

$$\boxed{p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}\,. \tag{46}$$

Von den Funktionen $p_i(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)$ werde vorausgesetzt, daß die Determinante

$$\det \frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}_j} = \det \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i\,\partial \dot{q}_j} \neq 0$$

ist. In diesem Fall kann man nämlich die Gl. (46) nach den $\dot{q}_i$ auflösen,

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_1, \ldots, p_1, \ldots, t)\,. \tag{47}$$

Damit ist man imstande, den Übergang

$$q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t \;\rightarrow\; q_1, \ldots, p_1, \ldots, t$$

zu den kanonisch konjugierten Variablen q_i, p_i vorzunehmen.

In den neuen Variablen ist es zweckmäßig, statt der LAGRANGE-Funktion die HAMILTON-Funktion zu benützen. Sie ist definiert durch

$$\boxed{H = \sum p_i \dot{q}_i - L} \tag{48}$$

und wird nach Gl. (47) eine Funktion der kanonischen Variablen,

$$H = H(p_1, \ldots, q_1, \ldots, t). \tag{49}$$

Dieser Übergang ist im mathematischen Sinn eine LEGENDRE-Transformation.

Um die Bewegungsgleichungen im HAMILTON-Formalismus zu gewinnen, bildet man von Gl. (48) das totale Differential

$$\mathrm{d}H = \sum \left(p_i\,\mathrm{d}\dot{q}_i + \dot{q}_i\,\mathrm{d}p_i - \frac{\partial L}{\partial q_i}\,\mathrm{d}q_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\,\mathrm{d}\dot{q}_i\right) - \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \mathrm{d}t$$

und berücksichtigt die Definitionsgleichung (46) sowie die LAGRANGEschen Gleichungen (12),

$$\mathrm{d}H = \sum (\dot{q}_i\,\mathrm{d}p_i - \dot{p}_i\,\mathrm{d}q_i) - \left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \mathrm{d}t. \tag{50}$$

Andererseits ist das totale Differential von Gl. (49)

$$\mathrm{d}H = \sum \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\,\mathrm{d}p_i + \frac{\partial H}{\partial q_i}\,\mathrm{d}q_i\right) + \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \mathrm{d}t. \tag{51}$$

Durch Vergleich dieser beiden Formeln folgen die HAMILTON*schen Gleichungen*

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{H} &= \left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = -\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \end{aligned}} \tag{52}$$

(und zweite Zeile mit Fußnote [1]).

Ist insbesondere $\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = 0$, so ist auch H explizit zeitunabhängig, und die totale zeitliche Veränderung von H ist Null, d. h. $H(p_1, \ldots, q_1, \ldots)$ ist eine Konstante der Bewegung,

$$H(p_1, \ldots, q_1, \ldots) = E \tag{53}$$

(Energiesatz).

b) Die Hamilton-Jacobische Gleichung

Die Differentialgleichungen (21) für die Wirkungsfunktion S lauten — wenn wir den Index 1 weglassen — in der HAMILTONschen Formulierung

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H \tag{54}$$

oder ineinander eingesetzt

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, q_i, t\right) = 0} \tag{55}$$

(HAMILTON-JACOBIsche Gleichung).

---

[1]) Dies folgt unmittelbar aus Gl. (50) und (51), wenn man Gl. (52_1, 52_2) einsetzt.

Ist H explizit zeitunabhängig [Gl. (53)], so genügt die charakteristische Funktion W [Gln. (26) u. (27)] der Differentialgleichung

$$H\left(p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}, q_i\right) = E. \tag{56}$$

Ein Beispiel hierfür stellt Gl. (30) dar.

Während wir in § 2 die Wirkungsfunktion S aus der bekannten Lösung des dynamischen Problems konstruierten[1]), kann man umgekehrt auf der HAMILTON-JACOBIschen Gleichung eine Integrationstheorie aufbauen: Die HAMILTONschen Gleichungen (52) sind die Charakteristiken der HAMILTON-JACOBIschen partiellen Differentialgleichung. Da dies jedoch im Rahmen des vorliegenden Buches nicht interessiert, wollen wir hierauf nicht weiter eingehen.

c) Definition der Poisson-Klammern

Es seien irgend zwei physikalische Größen

$$F = F(q_1, \ldots, p_1, \ldots, t), \quad G = G(q_1, \ldots, p_1, \ldots, t)$$

gegeben, die von den kanonischen Variablen und evtl. explizit von der Zeit abhängig sind. Dann definieren wir als POISSON-*Klammer* zwischen diesen Größen den Ausdruck

$$\boxed{\{F, G\} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i}\frac{\partial F}{\partial q_i}\right)}. \tag{57}$$

In der Theorie der kanonischen Transformationen kann man zeigen, daß die POISSON-Klammern zweier Größen F und G *unabhängig* von den zugrunde liegenden kanonischen Variablen sind,

$$\{F, G\}_{p,q} = \{F, G\}_{P,Q}. \tag{58}$$

Die Klammer $\{F, G\}$ ist also eine Eigenschaft der Größen F und G allein. Hierauf beruht die fundamentale Bedeutung der POISSON-Klammern.

Aus der Definition (57) folgt unmittelbar die Beziehung

$$\{F, G\} = -\{G, F\}, \tag{59}$$

insbesondere ist also

$$\{F, F\} = 0.$$

Ist c eine Konstante, so gilt

$$\{F, c\} = 0. \tag{60}$$

---

[1]) Die Wirkungsfunktion S läßt sich andererseits auch als Erzeugende einer kanonischen Transformation auffassen, die das dynamische Problem durch Gl. (55) auf Ruhe transformiert.

Für irgendeine Funktion $\Phi = \Phi(F_1, F_2, \ldots)$, wobei $F_\alpha = F_\alpha(p_1, \ldots, q_1, \ldots, t)$ ist, erhält man nach der Kettenregel der Differentiation

$$\{\Phi, G\} = \sum_\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial F_\alpha} \{F_\alpha, G\}. \tag{61}$$

Insbesondere gilt also

$$\{F_1 + F_2, G\} = \{F_1, G\} + \{F_2, G\} \tag{62}$$

und

$$\{F_1 F_2, G\} = \{F_1, G\} F_2 + F_1 \{F_2, G\}. \tag{63}$$

Schließlich ist für irgend drei Funktionen F_1, F_2, F_3 stets die POISSONsche Identität

$$\{F_1, \{F_2, F_3\}\} + \{F_2, \{F_3, F_1\}\} + \{F_3, \{F_1, F_2\}\} = 0 \tag{64}$$

erfüllt.

Ersetzt man in der Definitionsgleichung (57) G durch q_i bzw. p_i, so folgt

$$\{F, q_i\} = \frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad \{F, p_i\} = -\frac{\partial F}{\partial q_i}. \tag{65}$$

Für die kanonisch konjugierten Größen q_i und p_i gilt daher

$$\boxed{\{q_i, q_k\} = 0, \quad \{p_i, p_k\} = 0, \quad \{p_i, q_k\} = \delta_{ik}}. \tag{66}$$

Diese Gleichungen scheinen zunächst eine triviale Folge der Definition (57) zu sein. Ihre fundamentale Bedeutung zeigt sich jedoch, wenn man ihre Invarianz gegen kanonische Transformationen bedenkt [Gl. (58)].

d) Die Bewegungsgleichungen in Poisson-Klammern

Für eine beliebige mechanische Größe

$$F = F(q_1, \ldots, p_1, \ldots, t)$$

erhalten wir die totale zeitliche Veränderung

$$\frac{dF}{dt} = \sum \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i\right) + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\text{ex}} \tag{67}$$

im POISSON-Klammer-Formalismus, wenn wir in

$$\{H, F\} = \sum \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

die HAMILTONschen Gleichungen (52) berücksichtigen,

$$\{H, F\} = \sum \left(\dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i\right) \tag{68}$$

und in Gl. (67) einsetzen,

$$\boxed{\frac{dF}{dt} = \{H, F\} + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\text{ex}}}. \tag{69}$$

Setzt man $F = q_i$ bzw. p_i, so ergeben sich die HAMILTONschen Gleichungen in POISSON-Klammern

$$\dot{q}_i = \{H, q_i\}, \quad \dot{p}_i = \{H, p_i\}. \tag{70}$$

e) Erhaltungsgrößen

Eine Größe F heißt Erhaltungsgröße, wenn

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = 0 = \{H, F\} + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} \tag{71}$$

erfüllt ist. F ist dann vermöge der Bewegung zeitlich konstant.

Sind F_1 und F_2 Erhaltungsgrößen, so gilt dies auch für die POISSON-Klammer $\{F_1, F_2\}$ (Aufg. 9).

Aufg. 6: Man führe die HAMILTONsche Theorie für ein Teilchen in einem Potential $V(\mathfrak{r})$ durch.

Aufg. 7: Für den Drehimpuls $\mathfrak{l} = \mathfrak{r} \times \mathfrak{p}$ berechne man die POISSON-Klammern

$$\{l_i, x_k\}, \quad \{l_i, p_k\}, \quad \{l_i, l_k\},$$
$$\{l_i, \mathfrak{r}^2\}, \quad \{l_i, \mathfrak{p}^2\}, \quad \{l_i, \mathfrak{l}^2\}.$$

Aufg. 8: Was ergibt Gl. (69) für die zeitliche Veränderung des Drehimpulses eines Teilchen im Potential $V(\mathfrak{r})$?

Aufg. 9: F_1 und F_2 seien Erhaltungsgrößen. Man zeige, daß dann auch $\{F_1, F_2\}$ Erhaltungsgröße ist.

§ 5. Die Bewegung eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld

a) Das elektromagnetische Feld

Die Feldstärken $\mathfrak{E}(\mathfrak{r}, t)$ und $\mathfrak{B}(\mathfrak{r}, t)$ des elektromagnetischen Feldes sind in einem vorgegebenen Inertialsystem definiert durch die Kraft (LORENTZ)

$$\mathfrak{K} = q\left(\mathfrak{E} + \frac{\mathfrak{v}}{c} \times \mathfrak{B}\right), \tag{72}$$

die auf eine Probeladung q der Geschwindigkeit $\mathfrak{v}$ ausgeübt wird (GAUSSsches Maßsystem).

Die Relationen der Feldstärken untereinander sowie ihr Zusammenhang mit der felderzeugenden Ladungsverteilung $\varrho(\mathfrak{r}, t)$ und Stromverteilung $\mathfrak{i}(\mathfrak{r}, t)$ werden durch die MAXWELLschen Gleichungen (im Vakuum) beschrieben,

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathfrak{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{B}}{\partial t} &= 0, \qquad & \operatorname{div} \mathfrak{B} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathfrak{E} &= 4\pi\varrho, \qquad & \operatorname{rot} \mathfrak{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial t} &= \frac{4\pi}{c}\,\mathfrak{i}. \end{aligned}\right\} \tag{73}$$

Setzt man

$$\mathfrak{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} \varphi, \qquad \mathfrak{B} = \operatorname{rot} \mathfrak{A}, \tag{74}$$

so ist der in der ersten Zeile von Gl. (73) stehende Teil der MAXWELLschen Gleichungen auf Grund der Rechenregeln der Vektoranalysis von selbst erfüllt.

Die *elektromagnetischen Potentiale* $\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t)$ und $\varphi(\mathfrak{r}, t)$ sind durch die Gleichungen (74) nicht eindeutig definiert: Die durch eine *Eichtransformation*

$$\mathfrak{A} \to \mathfrak{A}' = \mathfrak{A} - \operatorname{grad} u,$$
$$\varphi \to \varphi' = \varphi + \frac{1}{c}\frac{\partial u}{\partial t} \tag{75}$$

[$u(\mathfrak{r}, t)$ ist eine beliebige Raum-Zeit-Funktion] entstehenden Potentiale $\mathfrak{A}'$ und φ' erfüllen nämlich ebenfalls die Gl. (74). Man kann diese Willkür dazu verwenden, um den elektromagnetischen Potentialen — die im Gegensatz zu den Feldern $\mathfrak{E}$ und $\mathfrak{B}$ keine unmittelbare physikalische Bedeutung besitzen — spezielle Nebenbedingungen („Eichungen") aufzuerlegen, z. B. die sogenannte LORENTZ-*Konvention*

$$\operatorname{div} \mathfrak{A}^{\mathrm{L}} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}^{\mathrm{L}}}{\partial t} = 0 \tag{76}$$

oder die „*transversale*" *Eichung*[1])

$$\operatorname{div} \mathfrak{A}^{T} = 0. \tag{77}$$

Setzt man die Gl. (74) in die zweite Zeile der MAXWELLschen Gleichungen (73) ein, so erhält man inhomogene Differentialgleichungen, welche die elektromagnetischen Potentiale mit den felderzeugenden Ladungen und Strömen verknüpfen. Die Gestalt dieser Gleichungen hängt von der zugrunde gelegten Eichung ab.

b) Die Lagrange-Funktion eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

Das NEWTONsche Grundgesetz für die Bewegung eines geladenen Teilchens in einem elektromagnetischen Feld lautet nach Gl. (72)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\mathfrak{v}) = q\left(\mathfrak{E} + \frac{\mathfrak{v}}{c} \times \mathfrak{B}\right). \tag{78}$$

Wir wollen diese Gleichung in die LAGRANGEsche Form bringen und daraus die zugehörige LAGRANGE-Funktion bestimmen. Dazu führen wir die elektromagnetischen Potentiale ein

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\mathfrak{v}) = q\left(-\operatorname{grad}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} + \frac{\mathfrak{v}}{c} \times \operatorname{rot}\mathfrak{A}\right)$$

und schreiben den letzten Term um[2])

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\mathfrak{v}) = q\left(-\operatorname{grad}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} - \left(\frac{\mathfrak{v}}{c}\operatorname{grad}\right)\mathfrak{A} + \operatorname{grad}\left(\frac{\mathfrak{v}}{c}\,\mathfrak{A}\right)\right).$$

Wegen

$$\frac{\mathrm{d}\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t)}{\mathrm{d}t} = (\mathfrak{v}\operatorname{grad})\,\mathfrak{A} + \frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t}$$

---

[1]) Für eine ebene Welle $\mathfrak{A}^T(\mathfrak{r}, t) = \mathfrak{A}_0^T\, e^{i(\mathfrak{k}\mathfrak{r} - \omega t)}$ gilt dann nämlich $\operatorname{div}\mathfrak{A}^T = i\,\mathfrak{k}\,\mathfrak{A}^T = 0$, d. h. $\mathfrak{A}^T$ steht senkrecht zur Ausbreitungsrichtung $\mathfrak{k}$.

[2]) Es gilt $\mathfrak{v} \times (\nabla \times \mathfrak{A}) = \nabla(\mathfrak{v}\,\mathfrak{A}) - (\mathfrak{v}\,\nabla)\,\mathfrak{A}$, weil $\mathfrak{v}$ unabhängig von $\mathfrak{r}$ ist.

nimmt die Bewegungsgleichung die Gestalt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m\mathfrak{v} + \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\right) = \operatorname{grad}\left(-q\varphi + q\,\frac{\mathfrak{v}}{c}\,\mathfrak{A}\right) \tag{79}$$

an. Durch Vergleich mit der LAGRANGEschen Gleichung (12) finden wir, daß die LAGRANGE-Funktion $L(\mathfrak{r}, \dot{\mathfrak{r}}, t)$ den Differentialgleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(-q\varphi + q\,\frac{\mathfrak{v}}{c}\,\mathfrak{A}\right), \tag{80}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{q}{c}\,A_i \tag{81}$$

genügen muß. Aus Gl. (80) folgt

$$L = -q\varphi + q\,\frac{\mathfrak{v}}{c}\,\mathfrak{A} + f(\dot{\mathfrak{r}}).$$

Durch Differentiation nach $\dot{x}_i$ und Vergleich mit Gl. (81) erhalten wir

$$\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i.$$

Nehmen wir die Masse geschwindigkeitsunabhängig an (nichtrelativistische Näherung), so ergibt sich

$$f = \frac{m}{2}\,\mathfrak{v}^2.$$

Die LAGRANGE-Funktion für die nichtrelativistische Bewegung eines geladenen Teilchens in einem vorgegebenen elektromagnetischen Feld lautet also

$$\boxed{L(\mathfrak{r}, \mathfrak{v}, t) = \frac{m}{2}\,\mathfrak{v}^2 + q\left(\frac{\mathfrak{v}}{c}\,\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t) - \varphi(\mathfrak{r}, t)\right)}\,. \tag{82}$$

c) Die Hamilton-Funktion eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

Differenzieren wir die LAGRANGE-Funktion nach der Geschwindigkeit, so erhalten wir als *kanonischen Impuls*

$$\boxed{\mathfrak{p} = m\mathfrak{v} + \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}}\,. \tag{83}$$

Er setzt sich aus dem *mechanischen Impuls* $m\mathfrak{v}$ und dem *„elektromagnetischen Impuls“* $\frac{q}{c}\,\mathfrak{A}$ zusammen.

Aus der Definitionsgleichung (48) folgt damit die HAMILTON-Funktion eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

$$\boxed{H(\mathfrak{r}, \mathfrak{p}, t) = \frac{1}{2m}\left(\mathfrak{p} - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t)\right)^2 + q\varphi(\mathfrak{r}, t)}\,. \tag{84}$$

Die HAMILTONschen Gleichungen führen natürlich wieder auf die Bewegungsgleichung (78) zurück.

d) Das magnetische Moment

Liegt insbesondere ein homogenes, statisches Magnetfeld $\mathfrak{B}_0$ vor, so läßt sich dieses durch das Vektorpotential

$$\mathfrak{A}(\mathfrak{r}) = -\frac{1}{2}(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0) \qquad (\mathfrak{B}_0 = \text{const}) \tag{85}$$

darstellen. Man verifiziert nämlich nach den elementaren Regeln der Vektorrechnung, daß die Rotation dieses Ausdruckes in der Tat $\mathfrak{B}_0$ ist. Außerdem ist $\mathfrak{A}$ dann divergenzfrei. — Durch Einsetzen dieses Vektorpotentials in die HAMILTON-Funktion (84) erhalten wir den magnetischen Beitrag

$$H_m = -\frac{q}{2mc}\,\mathfrak{B}_0(\mathfrak{r}\times\mathfrak{p}) + \frac{q^2}{8mc^2}(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0)^2. \tag{86}$$

Setzen wir im ersten Term für $\mathfrak{r}\times\mathfrak{p}$ den Bahndrehimpuls $\mathfrak{l}$ (gebildet mit dem *kanonischen* Impuls $\mathfrak{p}$) ein, und berücksichtigen wir im zweiten Term die Vektoridentität

$$(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0)^2 = -\big(\mathfrak{r}\times(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0)\big)\,\mathfrak{B}_0,$$

so erhalten wir

$$H_m = -\frac{q}{2mc}\,\mathfrak{l}\,\mathfrak{B}_0 - \frac{q^2}{8mc^2}\big(\mathfrak{r}\times(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0)\big)\,\mathfrak{B}_0. \tag{87}$$

Weil die Energie eines permanenten magnetischen Dipols $\mathfrak{m}$ in einem äußeren Feld $\mathfrak{B}_0$ gerade $-\mathfrak{m}\,\mathfrak{B}_0$ ist, führt der erste Term von Gl. (87) auf ein *permanentes magnetisches Bahnmoment* proportional zum Bahndrehimpuls des Teilchens

$$\boxed{\mathfrak{m}_l = \frac{q}{2mc}\,\mathfrak{l}}\,.^{1)} \tag{88}$$

In diesem *magnetomechanischen Parallelismus* kommt die AMPÈREsche Deutung des Magnetismus durch Elementarströme zum Ausdruck: Die den Kern umlaufenden Elektronen stellen einen Kreisstrom dar, der ein magnetisches Moment besitzt. Das permanente Moment $\mathfrak{m}_l$ ist, gemeinsam mit jenem des Spins (4.3 § 5), die Ursache des *Paramagnetismus.*

Während das magnetische Moment (88) nicht vom angelegten Magnetfeld abhängig ist, gibt der zweite Term von Gl. (87) zu einem *induzierten magnetischen Moment* $\mathfrak{m}_{\text{ind}}$ Anlaß, das also durch das angelegte Feld $\mathfrak{B}_0$ erst erzeugt wird. Weil die Energie eines induzierten Momentes $-\frac{1}{2}\,\mathfrak{m}_{\text{ind}}\,\mathfrak{B}_0$ beträgt, erhalten wir

$$\boxed{\mathfrak{m}_{\text{ind}}(\mathfrak{B}_0) = \frac{q^2}{4mc^2}\big(\mathfrak{r}\times(\mathfrak{r}\times\mathfrak{B}_0)\big)}\,. \tag{89}$$

Dieses magnetische Moment führt zum *Diamagnetismus.*

---

[1]) Für Elektronen ist $q_{\text{el}} = -e$ (e = positive Elementarladung), d. h., $\mathfrak{m}_l$ ist antiparallel zu $\mathfrak{l}$ gerichtet.

Mit den so definierten magnetischen Momenten eines geladenen Teilchens lautet der magnetische Anteil der HAMILTON-Funktion

$$H_m = -\mathfrak{m}_l \mathfrak{B}_0 - \frac{1}{2} \mathfrak{m}_{\text{ind}} \mathfrak{B}_0. \tag{90}$$

Für das gesamte magnetische Bahnmoment ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathfrak{m} = \mathfrak{m}_l + \mathfrak{m}_{\text{ind}} &= \frac{q}{2\,m\,c}\,\mathfrak{r} \times \left(\mathfrak{p} + \frac{q}{2\,c}\,\mathfrak{r} \times \mathfrak{B}_0\right) \\ &= \frac{q}{2\,m\,c}\,\mathfrak{r} \times \left(\mathfrak{p} - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\right) \\ &= \frac{q}{2\,c}\,\mathfrak{r} \times \mathfrak{v}. \end{aligned}$$

Es ist proportional zu dem mit der Geschwindgkeit $\mathfrak{v}$ gebildeten Drehimpuls $(\mathfrak{r} \times m\,\mathfrak{v})$.

Aufg. 10: Man berechne die POISSON-Klammern zwischen den Geschwindigkeitskomponenten eines Teilchens im elektromagnetischen Feld.

Aufg. 11: Warum ist die Bahn eines Teilchens in einem magnetostatischen Feld nicht senkrecht auf den W-Flächen?

Drittes Kapitel

Das Schrödingersche Materiefeld

§ 1. Die Bedeutung der Feldgleichungen der Materie

Zur Beschreibung der in den Interferenzerscheinungen sich zeigenden *Welleneigenschaft der Materie* ist es nötig, „*klassische*“ *Feldgleichungen* abzuleiten, die das Materiefeld in ähnlicher Weise erfassen wie die MAXWELLschen Gleichungen das elektromagnetische Feld. Es werden also z. B. Elektronen, Protonen, Neutronen usw. nicht als punktförmige Teilchen interpretiert, sondern als Felder. Die Stärke der Felder wird durch Feldamplituden $\psi_i(\mathfrak{r}, t)$ beschrieben, deren Abhängigkeit von Raum und Zeit durch die Feldgleichungen bestimmt wird. *Elektronen, Protonen, Neutronen usw. sind also im klassischen Wellen- oder Feldbild der Materie nach Maßgabe der Feldamplitude als „Materiewolke“ mehr oder weniger über den ganzen Raum verschmiert.*

An dieser Stelle tritt eine gewisse sprachliche Schwierigkeit auf: Elektronen, Protonen, Neutronen, Photonen und alle anderen mikroskopischen Erscheinungsformen von Materie oder Energie werden zusammenfassend als *Elementar„teilchen“* bezeichnet. Dieses Wort ist aus dem Teilchenbild genommen und eigentlich wenig geeignet, der Dualität der Materie Rechnung zu tragen. Es wäre daher an sich zweckmäßiger, einen übergeordneten Sammelbegriff einzuführen, etwa „*Elementarmaterie*“, die sich im Teilchenbild als „Elementarteilchen“ und im Wellenbild als „Elementarfeld“ manifestiert. Die Quantentheorie wäre damit eine Beschreibung der Elementarmaterie, die je nach den Versuchsbedingungen ent-

weder als Elementarteilchen oder als Elementarfeld erscheint. Da sich jedoch eine solche sprachliche Unterscheidung nicht eingebürgert hat, wollen wir im folgenden das Wort „Elementarteilchen" als übergeordneten Sammelbegriff im Sinn von „Elementarmaterie" gebrauchen und das Suffix „teilchen" nicht als einen Hinweis auf das Teilchenbild auffassen.

Die verschiedenen Elementarteilchen unterscheiden sich z. B. in ihrer Masse und Ladung, also durch Größen, die im Teilchenbild eine verschiedene Bewegung vermöge der Gesetze der Mechanik liefern. Da diese *dynamischen Eigenschaften* auch in der dualen Beschreibung durch ein Materiefeld in gewisser Weise enthalten sein müssen, ist es notwendig, sich bei der Aufstellung der Materiefeldgleichungen von Prinzipien leiten zu lassen, die einen engen Kontakt mit der Mechanik gewährleisten. Für hochenergetische Teilchen ist es dabei nötig, einen Zusammenhang mit der relativistischen Mechanik herzustellen, wie es überhaupt eine wesentliche Forderung für die Allgemeingültigkeit einer Feldgleichung ist, daß sie der relativistischen Struktur von Raum und Zeit Rechnung trägt, d. h. *relativistisch invariant* ist. Die Feldgleichungen müssen also im vierdimensionalen Vektor- (bzw. Spinor-)kalkül formuliert werden. Das elektromagnetische Feld, dessen relativistische Invarianz gerade zur Erkennung der richtigen Raum-Zeit-Struktur führte, hat wegen des Verschwindens von Ruhmasse und Ladung die Eigenheit, daß die Mechanik der Photonen stark degeneriert ist.

Außer durch Masse und Ladung unterscheiden sich die verschiedenen Elementarteilchen noch durch andere *„innere" Eigenschaften* (z. B. den *Spin*), die im Rahmen der Punktmechanik keinen oder kaum einen Platz haben. Im Rahmen einer feldtheoretischen Beschreibung bedeuten diese Eigenschaften aber nichts anderes als ein bestimmtes *Transformationsverhalten der Feldkomponenten* $\psi_i(\mathfrak{r}, t)$, etwa bei Raumdrehungen. Die MAXWELLsche Theorie liefert uns hierfür ein bekanntes Beispiel: Die Polarisation des Lichtes — oder, was dasselbe bedeutet, der Spin der Photonen — ist bedingt durch den Vektorcharakter der Feldstärken.

Um die einfachsten und zugleich aber wichtigsten Feldeigenschaften der Materie kennenzulernen, wollen wir in diesem Buch auf relativistische Formulierungen verzichten und zunächst auch den Spin unberücksichtigt lassen [auf ihn kommen wir in 1.7 § 4b u. 4.3 § 4 zu sprechen]. Wir legen uns also die Frage vor, wie die Gleichung der Feldamplitude von Materiewellen lautet, denen im Partikelbild Teilchen entsprechen, welche sich in einem vorgegebenen Potential nach der NEWTONschen Mechanik bewegen. Die Gleichung, die wir damit erhalten werden, ist die *SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung.* Sie beschreibt die raumzeitliche Verteilung eines nichtrelativistischen Materiefeldes ohne Spin in ähnlicher Weise wie die MAXWELLschen Gleichungen die raum-zeitliche Verteilung des elektromagnetischen Feldes wiedergeben. *Die SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung hat also mit der Quantentheorie ebensowenig zu tun wie die MAXWELLschen Gleichungen.*

Es sei an dieser Stelle schließlich noch einmal ausdrücklich betont, daß *eine klassische Feldtheorie der Elementarteilchen für sich allein noch keine befriedigende Beschreibung des Verhaltens des Mikrokosmos liefert.* Mit ihrer Hilfe ist es nur möglich, die Welleneigenschaften der Materie zu beschreiben, aber nicht die Partikeleigenschaften; z. B. stellt die MAXWELLsche Elektrodynamik eben nur eine befriedigende Theorie für alle elektromagnetischen Wellenvorgänge dar, aber sie ist nicht imstande, den Photoeffekt zu erklären. Entsprechendes gilt für alle Feldtheorien der Materie. *Erst mit Hilfe der Quantentheorie* (Kap. 4.5 u. 4.6) *wird es möglich, das Problem der Dualität zwischen Welle und Korpuskel zu bewältigen.*

§ 2. Nichtrelativistische, kräftefreie Materiewellen

Als Vorbereitung für die Herleitung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung werde zunächst als einfachstes Beispiel für das Problem der Dualität von Welle und Korpuskel die Bewegung eines (nichtrelativistischen) Elektrons betrachtet, das keinen äußeren Einflüssen unterliegt. In der Korpuskelvorstellung wird dieser Vorgang durch die Bewegung eines kräftefreien Teilchens dargestellt, das sich nach den Gesetzen der klassischen Mechanik mit konstanter Geschwindigkeit $\mathfrak{v}_T$ im Raum fortbewegt. Im Wellenbild wird man zunächst daran denken, diesen Vorgang durch eine ebene Welle

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathfrak{k}\mathfrak{r} - \omega t)} \tag{1}$$

mit einer Frequenz ω und einem Ausbreitungsvektor $\mathfrak{k}$ ($|\mathfrak{k}| = 2\pi/\lambda$) zu beschreiben, die sich in Richtung der Elektronenbewegung geradlinig ausbreitet, also $\mathfrak{k} \parallel \mathfrak{v}_T$.

Es ist aber kaum zu erwarten, daß eine unendlich ausgedehnte, homogene ebene Welle eine Beschreibung ist, die der im Teilchenbild gegebenen punktförmigen Lokalisierung des Elektrons adäquat ist. Man wird vielmehr versucht sein, im Wellenbild das Elektron durch ein auf ein endliches Raumgebiet lokalisiertes *Wellenpaket* (Fig. 11) zu beschreiben.

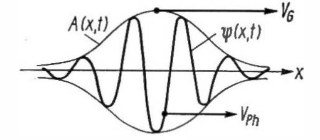


Fig. 11. Ein Wellenpaket

Ein solches Wellenpaket kann man durch Superposition ebener Wellen (1), die sich in den Amplituden und Frequenzen unterscheiden, aufbauen. Betrachten wir der Einfachheit halber das Problem eindimensional, so bedeutet dies

$$\boxed{\psi(x, t) = \int A(k')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k'x - \omega(k')t]}\,\mathrm{d}k'}\,. \tag{2}$$

Die spezielle Struktur der räumlichen Verteilung des Wellenpaketes wird durch die spezielle Wahl der Funktion $A(k')$ bestimmt. Ist die Amplitudenverteilung $A(k')$ nur in einer kleinen Umgebung einer mittleren Wellenzahl k wesentlich

von Null verschieden (Fig. 12), so gibt nur diese Umgebung einen wesentlichen Beitrag zum Integral. Man kann dann auch die Frequenzverteilung $\omega(k')$ durch die Entwicklung

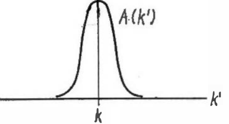


Fig. 12. Amplitudenverteilung $A(k')$ um eine mittlere Wellenzahl k

$$\omega(k') = \omega(k) + \frac{d\omega}{dk}(k' - k)$$

ersetzen. In der Variablen $\bar{k} = k' - k$ schreibt sich daher das Wellenpaket

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int A(\bar{k})\, e^{i\bar{k}\left[x - \frac{d\omega}{dk}t\right]}\, d\bar{k} \cdot e^{i[kx - \omega(k)t]} \\ &= A(x, t)\, e^{i[kx - \omega(k)t]}.\end{aligned} \tag{3}$$

Dieses Paket besteht aus einer Trägerwelle

$$e^{i(kx - \omega t)},$$

die sich mit der *Phasengeschwindigkeit*

$$v_{Ph} = \frac{\omega}{k} \tag{4}$$

ausbreitet. Die Trägerwelle wird durch die Funktion $A(x, t)$, welche die räumliche Lokalisierung des Wellenpaketes angibt, moduliert. Diese Einhüllende bewegt sich nach Gl. (3) mit der *Gruppengeschwindigkeit*

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} \tag{5}$$

fort.

Auf Grund dieser Eigenschaft ist es naheliegend, die Gruppengeschwindigkeit v_G der Materiewelle mit der Teilchengeschwindigkeit v_T zu identifizieren (Fig. 13). Andererseits erhebt sich die Frage, welche Geschwindigkeit im Partikelbild der Phasengeschwindigkeit der Welle zuzuordnen ist. Dazu erinnern wir uns, daß nach 1.2 § 2 die Ausbreitung der Wirkungsflächen $S(\mathfrak{r}, t) = \text{const}$ mit einer Geschwindigkeit $v_S = \frac{E}{p}$ erfolgt. Da diese Geschwindigkeit offenbar eine Bedeutung hat, die große Ähnlichkeit mit jener der Phasengeschwindigkeit besitzt, ist es naheliegend, v_{Ph} mit v_S zu identifizieren,

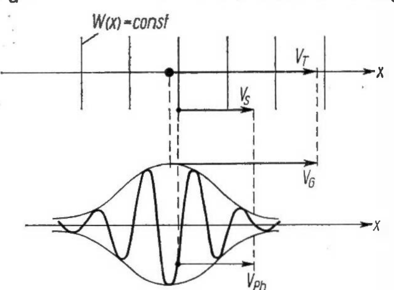


Fig. 13. Zum Zusammenhang zwischen Teilchen- und Wellenbild

$$\boxed{\begin{aligned} v_G &= v_T \\ v_{Ph} &= v_S \end{aligned}}\,. \tag{6}$$

Setzen wir die aus der Wellentheorie und der Mechanik des freien Teilchens bekannten Größen ein, so erhalten wir

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m}, \qquad \frac{\omega}{k} = \frac{p}{2m}. \tag{7}$$

Eliminiert man hieraus $\frac{p}{m}$, so ergibt sich für $\omega(k)$ eine Differentialgleichung mit der Lösung $\omega = Ck^2$. Die Integrationskonstante wollen wir $C = 1/2\mu$ nennen. Damit ist die *Dispersion der kräftefreien Materiewelle* gegeben durch

$$\boxed{\omega(k) = \frac{k^2}{2\mu}}. \tag{8}$$

Die Größe μ ist eine die verschiedenen Materiewellen charakterisierende Konstante. Da sie die Dispersion der Wellen bestimmt, ist sie eine rein im Wellenbild interpretierbare Größe.

Zwischen den Teilcheneigenschaften p bzw. $E = \frac{p^2}{2m}$ und den Welleneigenschaften k bzw. ω liefern die Gl. (7) und (8) die Relationen

$$p = \frac{m}{\mu}\, k \quad \text{und} \quad E = \frac{m}{\mu}\, \omega, \tag{9}$$

also gerade die DE BROGLIEschen Beziehungen

$$\boxed{p = \hbar k \quad \text{und} \quad E = \hbar \omega}, \tag{10}$$

wenn man

$$\boxed{\frac{m}{\mu} = \hbar} \tag{11}$$

setzt. Diese Gleichung gibt den Zusammenhang zwischen der Masse m als Teilcheneigenschaft und der Dispersionskonstanten μ als Welleneigenschaft. Das Wirkungsquantum $\hbar$ ist die die beiden dualen Beschreibungen der Natur verbindende Größe. Im reinen Wellenbild hingegen hat $\hbar$ ebensowenig einen Sinn wie im reinen Teilchenbild. *Das Auftreten von $\hbar$ bedeutet stets, daß man Teilchenbegriffe mit Wellenbegriffen korreliert.*

Die vorstehenden Überlegungen zeigen, daß *die Dispersionsbeziehung* (8) *der Materiewellen die zum Energiesatz der Teilchen duale Relation ist.*

Die durch Interferenzversuche gegebene experimentelle Bestätigung der DE BROGLIE-Beziehungen bedeutet, daß das zu ihrer Ableitung benützte Konzept (6) geeignet ist, als Leitschnur für die Herleitung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung zu dienen.

§ 3. Das Konzept zur Herleitung der Schrödingerschen Materiefeldgleichung

Zur Herleitung der Differentialgleichung für die Amplitude $\psi(\mathfrak{r}, t)$ des Materiefeldes, der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung, sind die folgenden Argumente maßgebend:

1. Die Interferenzerscheinungen, die durch das Materiefeld beschrieben werden sollen, machen es notwendig, daß für die Feldfunktion $\psi(\mathfrak{r}, t)$ das *Superpositionsprinzip* gilt, d. h., daß mit ψ_1 und ψ_2 auch $\psi_1 + \psi_2$ eine Lösung der Feldgleichung ist. Es muß daher die Feldgleichung *linear* sein. Wenn man außerdem verlangt, daß das Materiefeld keine Quellen oder Senken besitzen soll, so muß die Feldgleichung auch noch *homogen* sein[1]), also von dem Typ

$$\Big[a(\mathfrak{r}, t) + \sum_k^3 b_k(\mathfrak{r}, t) \frac{\partial}{\partial x_k} + b_0(\mathfrak{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k,l} c_{kl}(\mathfrak{r}, t) \frac{\partial^2}{\partial x_k\, \partial x_l} + \sum_k^3 c_{k0}(\mathfrak{r}, t) \frac{\partial^2}{\partial x_k\, \partial t} + c_{00}(\mathfrak{r}, t) \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \cdots\Big] \psi(\mathfrak{r}, t) = 0, \tag{12}$$

mit Koeffizienten $a, b, c, \ldots$, die Funktionen der räumlichen Koordinaten x_k und der Zeit t sein können und die es im folgenden zu bestimmen gilt. Eine weitere Forderung an die Feldgleichung ist — wie immer in der theoretischen Physik —, daß sie, im Rahmen der gegebenen Notwendigkeiten, möglichst *einfach* sein soll. Wir wollen daher versuchen, höhere raum-zeitliche Differentiationen, die in Gl. (12) durch „...“ angedeutet sind, zu vermeiden.

2. Aus der Optik ist bekannt, daß man von der Wellennatur des Lichtes absehen kann, wenn die relativen Amplitudenveränderungen einer (nahezu ebenen) Welle auf der Strecke λ klein gegen eins sind.

Macht man zur Lösung der Wellengleichung der Optik

$$\Delta u = \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \tag{a}$$

(n = Brechungsindex) den Ansatz

$$u(\mathfrak{r}, t) = A(\mathfrak{r})\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t - k_0 F(\mathfrak{r})]}, \tag{b}$$

so erhält man für die reellen Größen A und F die komplexe Gleichung

$$\Delta A - 2\mathrm{i} k_0 \operatorname{grad} A \operatorname{grad} F - \mathrm{i} k_0 A\, \Delta F - k_0^2 A (\operatorname{grad} F)^2 + n^2 k_0^2 A = 0.$$

Zerlegt man diese nach Real- und Imaginärteil, so resultieren die beiden Relationen

$$\frac{\Delta A}{k_0^2 A} - (\operatorname{grad} F)^2 + n^2 = 0$$

und

$$2 \operatorname{grad} A \operatorname{grad} F + A\, \Delta F = 0. \tag{c}$$

[1]) Die Gleichung div $\mathfrak{D} = 4\pi\varrho$ der Elektrostatik ist inhomogen: Die Raumladungen sind die Quellen und Senken des $\mathfrak{D}$-Feldes.

Sind die relativen Änderungen der Amplitude A auf der Strecke $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ klein gegen eins, $\Delta A/A \ll k_0^2$, so wird aus der ersten Beziehung

$$(\text{grad}\, F)^2 \approx n^2 \tag{d}$$

eine Differentialgleichung für das „*Eikonal*“ $F(\mathfrak{r})$. Die Flächen $F = \text{const}$ sind nach dem Ansatz (b) Flächen konstanter Phase von u. Die Normale dieser Wellenflächen, gegeben durch grad F, bilden die Strahlrichtungen der geometrischen Optik.

Zwischen geometrischer Optik und klassischer Mechanik besteht eine enge Analogie, da beide aus einem Variationsprinzip hergeleitet werden können: Dem Fermatprinzip $\delta \int n\, ds = 0$ steht das Wirkungsprinzip $\delta \int L\, dt = 0$ gegenüber. Die Eikonalgleichung (d) entspricht der Gl. (1.2–30) für die charakteristische Funktion $W(\mathfrak{r})$ in der Mechanik.

Auch bei Materiewellen werden für genügend kleine Wellenlängen die spezifischen Welleneigenschaften immer mehr verlorengehen. Wir wollen daher die Feldgleichung so einrichten, daß die in dieser Grenze vorhandenen Eigenschaften gerade das Partikelbild, d. h. das Verhalten gemäß der klassischen Mechanik, widerspiegeln. Dazu zerlegen wir das Materiefeld nach Betrag und Phase

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = A(\mathfrak{r}, t)\, e^{iG(\mathfrak{r}, t)} \qquad (A, G \text{ reell}) \tag{13}$$

und verlangen — in Fortführung der für ebene Wellen gezeigten Übereinstimmung von Phasengeschwindigkeit und Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wirkungsflächen —, daß die Phase $G(\mathfrak{r}, t)$ von Materiewellen genügend kleiner Wellenlänge die HAMILTON-JACOBIsche Gleichung

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathfrak{r}, \mathfrak{p} = \text{grad}\, S, t) = 0 \tag{14}$$

erfüllt. Da G dimensionslos ist und S die Dimension einer Wirkung hat, ist es naheliegend, das Wellenbild mit dem Teilchenbild durch

$$\hbar G(\mathfrak{r}, t) \approx S(\mathfrak{r}, t) \quad (\text{für kleine Wellenlängen}^{1)}) \tag{15}$$

zu verknüpfen. Das Verfahren ist also jetzt gerade umgekehrt zu jenem der Herleitung der geometrischen Optik: *Die unbekannte Feldgleichung für $\psi(\mathfrak{r}, t)$ wird durch die Forderung bestimmt, daß die „Eikonalgleichung“ des Materiefeldes mit der* HAMILTON-JACOBI*schen Gleichung übereinstimmt.*

3. Zur vollständigen Ermittlung der Feldgleichung ist es nötig, über die (reelle) Amplitude $A(\mathfrak{r}, t)$ in zweckmäßiger Weise zu verfügen. Zunächst ist es naheliegend, das Amplitudenquadrat

$$A^2 = \psi^* \psi = \text{const} \cdot \varrho(\mathfrak{r}, t) \tag{16}$$

als *Dichte* ϱ der Materieverteilung in einem Raum-Zeit-Punkt zu deuten. Da das Materiefeld keine Quellen oder Senken haben soll, ist zu fordern, daß eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \text{div}\, \mathfrak{i} = 0 \tag{17}$$

erfüllt ist.

[1]) Die genauere Bedingung, unter der diese Gleichsetzung erlaubt ist, wird sich aus den weiteren Rechnungen ergeben [Gl. (30)].

Um auch im *Teilchenbild* eine entsprechende Materieverteilung zu gewinnen, betrachten wir die Gesamtheit aller mechanischen Bahnen, die von einem festen Punkt P^0 ausgehen (1.2 § 2) und berechnen die Geschwindigkeit, die ein Teilchen an einer Stelle $\mathfrak{r}$ zur Zeit t besitzt,

$$\mathfrak{v}_T = \mathfrak{v}_T(\mathfrak{r}, t, P^0). \tag{18}$$

Damit haben wir ein Geschwindigkeitsfeld vor uns, das sich dadurch realisieren läßt, daß man eine Vielzahl unabhängiger Teilchen gleicher Masse betrachtet, die alle derselben Kraft bzw. HAMILTON-Funktion unterworfen sind, sich aber im Anfangspunkt P^0 durch verschiedene Anfangsgeschwindigkeiten $\mathfrak{v}_T^0$ unterscheiden. Die Dichte dieser Materieverteilung ϱ in einem bestimmten Raum-Zeit-Punkt muß der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div} \varrho\, \mathfrak{v}_T = 0 \tag{19}$$

genügen, weil kein Massenpunkt entstehen oder verschwinden kann (Aufg. 12).

Bei der Herleitung der Materiefeldgleichung wollen wir es wiederum so einrichten, daß im Grenzfall kleiner Wellenlängen die wellenmechanische Kontinuitätsgleichung (17) in die partikelmechanische Gleichung (19) übergeht.

Aufg. 12: Man zeige, daß nach der klassischen Mechanik aus der Materieerhaltung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V(t)} \varrho(\mathfrak{r}, t)\, \mathrm{d}^3x = 0$$

in einem mit der Materie mitbewegten Volumen $V(t)$ die Kontinuitätsgleichung (19) folgt.

§ 4. Das Materiefeld unter dem Einfluß eines Potentials

Nach dem eben entwickelten Konzept möge nun die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung für eine Materiewelle, die unter dem Einfluß eines Potentials $V(\mathfrak{r})$ steht, hergeleitet werden.

Die zugehörige HAMILTON-JACOBIsche Gleichung (14) für die Wirkungsfunktion $S(\mathfrak{r}, t)$ des *Teilchenbildes* lautet

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \sum_k \left(\frac{\partial S}{\partial x_k}\right)^2 + V(\mathfrak{r}) = 0. \tag{20}$$

Die Kontinuitätsgleichung (19), die wir in der Form

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \mathfrak{v}_T \operatorname{grad} \varrho + \varrho \operatorname{div} \mathfrak{v}_T = 0$$

schreiben, nimmt wegen

$$\mathfrak{v}_T = \frac{\mathfrak{p}}{m} = \frac{1}{m} \operatorname{grad} S$$

die Gestalt

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{1}{m} \sum_k \frac{\partial S}{\partial x_k} \frac{\partial \varrho}{\partial x_k} + \frac{\varrho}{m} \sum_k \frac{\partial^2 S}{\partial x_k^2} = 0 \tag{21}$$

an.

Andererseits zerlegen wir in der *gesuchten Feldgleichung* (12) das Feld nach Betrag und Phase [Gl. (13)] und erhalten damit (nach Division durch ψ)

$$\begin{aligned} a + \sum_k b_k \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k} + \mathrm{i} \frac{\partial G}{\partial x_k}\right) + b_0 \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial t} + \mathrm{i} \frac{\partial G}{\partial t}\right) \\ + \sum_{k,l} c_{kl} \left(\frac{1}{A} \frac{\partial^2 A}{\partial x_k \, \partial x_l} + \frac{2\mathrm{i}}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l} + \mathrm{i} \frac{\partial^2 G}{\partial x_k \, \partial x_l} - \frac{\partial G}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l}\right) + \cdots = 0 . \end{aligned} \tag{22}$$

Dabei sind bereits alle weiteren Glieder, die sich im folgenden als Null erweisen werden, nur durch „...“ angedeutet. Zerlegt man die noch unbekannten, komplexen Koeffizienten a, b_k, b_0, c_{kl}, ... in ihre Real- und Imaginärteile,

$$a = a^1 + \mathrm{i} a^2, \ldots,$$

so ergibt die Aufspaltung der komplexen Gl. (22) in Real- und Imaginärteil die beiden reellen Gleichungen

$$\begin{aligned} a^1 + \sum_k \left(\frac{b_k^1}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k} - b_k^2 \frac{\partial G}{\partial x_k}\right) + \frac{b_0^1}{A} \frac{\partial A}{\partial t} - b_0^2 \frac{\partial G}{\partial t} \\ + \sum_{k,l} c_{kl}^1 \left(\frac{1}{A} \frac{\partial^2 A}{\partial x_k \, \partial x_l} - \frac{\partial G}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l}\right) - \sum_{k,l} c_{kl}^2 \left(\frac{2}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l} + \frac{\partial^2 G}{\partial x_k \, \partial x_l}\right) + \cdots = 0 \end{aligned} \tag{23}$$

und

$$\begin{aligned} a^2 + \sum_k \left(b_k^1 \frac{\partial G}{\partial x_k} + \frac{b_k^2}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k}\right) + b_0^1 \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{b_0^2}{A} \frac{\partial A}{\partial t} \\ + \sum_{k,l} c_{kl}^1 \left(\frac{2}{A} \frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l} + \frac{\partial^2 G}{\partial x_k \, \partial x_l}\right) + \sum_{k,l} c_{kl}^2 \left(\frac{1}{A} \frac{\partial^2 A}{\partial x_k \, \partial x_l} - \frac{\partial G}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_l}\right) + \cdots = 0 , \end{aligned} \tag{24}$$

die ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem für Betrag und Phase des Feldes darstellen.

Die *Koeffizienten der Feldgleichung* werden nun dadurch bestimmt, daß diese Gleichungen wenigstens für kleine Wellenlängen in die mechanischen Gleichungen (20) und (21) übergehen sollen, d. h. entsprechend Gl. (15) und (16) in

$$\hbar \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \left(\frac{\partial G}{\partial x_k}\right)^2 + V(\mathfrak{r}) = 0, \tag{25}$$

$$-\frac{\hbar}{A} \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\partial^2 G}{\partial x_k^2} - \frac{\hbar^2}{mA} \sum_k \frac{\partial A}{\partial x_k} \frac{\partial G}{\partial x_k} = 0 \tag{26}$$

(für kleine Wellenlängen).

Dieses Ziel wird erreicht, wenn man als Koeffizienten

$$\begin{aligned} a^1 = V, \ b_k^1 = 0, \ b_0^1 = 0, \ c_{kl}^1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{kl}, \\ a^2 = 0, \ b_k^2 = 0, \ b_0^2 = -\hbar, \ c_{kl}^2 = 0 \end{aligned} \tag{27}$$

wählt und alle übrigen Koeffizienten (...) Null setzt. Die Feldgleichungen (23) und (24) nehmen damit die Gestalt

$$\hbar \frac{\partial G}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Delta A}{A} - (\operatorname{grad} G)^2\right] + V(\mathfrak{r}) = 0, \tag{28}$$

$$\frac{\hbar}{A}\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta G + \frac{2}{A}\operatorname{grad} A \operatorname{grad} G\right] = 0 \tag{29}$$

an. Wir sehen, daß Gl. (29) direkt mit Gl. (26) übereinstimmt, während sich Gl. (28) im 2. Term von Gl. (25) unterscheidet. Für

$$\left|\frac{\Delta A}{A}\right| \ll (\operatorname{grad} G)^2 \tag{30}$$

geht somit die Feldgleichung in die HAMILTON-JACOBIsche Gleichung der Mechanik über. Bei nahezu ebenen Wellen ist $G(\mathfrak{r}, t) \approx \mathfrak{k}\mathfrak{r} - \omega t$, so daß

$$\left|\frac{\Delta A}{A}\right| \ll k^2 \tag{30a}$$

sein muß, also dieselbe Bedingung, die für die Gültigkeit der geometrischen Optik notwendig ist: Die relative Veränderung der Amplitude A muß auf der Strecke $\lambda = 2\pi/k$ klein gegen eins sein. Für die Wellenlänge λ dieser nahezu ebenen Materiewellen liefert in dieser Näherung die Gl. (28)

$$\lambda \approx \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(\hbar\omega - V)}}. \tag{31}$$

Setzen wir die Koeffizienten (27) in Gl. (12) ein, so erhalten wir

$$\boxed{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = 0}, \tag{32}$$

die Differentialgleichung für das komplexe Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ unter dem Einfluß eines Potentials $V(\mathfrak{r})$, die SCHRÖDINGER*sche Feldgleichung.*

Aufg. 13: Welcher „Brechungsindex" ergibt sich für ebene Materiewellen, die von einem Gebiet mit $V = V_1$ in ein anderes Gebiet mit $V = V_2$ übergehen?

§ 5. Das Materiefeld unter dem Einfluß eines elektromagnetischen Feldes

Die Bewegung eines *geladenen Teilchens* in einem vorgegebenen elektromagnetischen Feld wird durch die HAMILTON-Funktion [Gl. (1.2–84)]

$$H(\mathfrak{r}, \mathfrak{p}, t) = \frac{1}{2m}\left(\mathfrak{p} - \frac{q}{c}\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t)\right)^2 + q\varphi(\mathfrak{r}, t) \tag{33}$$

beschrieben. Die HAMILTON-JACOBIsche Gleichung lautet daher

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\operatorname{grad} S - \frac{q}{c}\mathfrak{A}\right)^2 + q\varphi = 0. \tag{34}$$

Wegen

$$\mathfrak{v}_T = \frac{1}{m}\left(\mathfrak{p} - \frac{q}{c}\mathfrak{A}\right) = \frac{1}{m}\left(\operatorname{grad} S - \frac{q}{c}\mathfrak{A}\right) \tag{35}$$

nimmt die mechanische Kontinuitätsgleichung (19) jetzt die Gestalt

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \frac{1}{m}\left(\operatorname{grad} S - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\right)\operatorname{grad}\varrho + \frac{\varrho}{m}\left(\Delta S - \frac{q}{c}\operatorname{div}\mathfrak{A}\right) = 0 \tag{36}$$

an.

Zur Herleitung der SCHRÖDINGER*schen Feldgleichung für ein geladenes Materiefeld* im vorgegebenen elektromagnetischen Feld gehen wir wieder nach dem in § 3 entwickelten Konzept vor. Die Anpassung (bei kleinen Wellenlängen) an die mechanischen Gleichungen (34) und (36) führt jetzt auf die Feldgleichung

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{q\hbar}{mc\mathrm{i}}\,\mathfrak{A}\operatorname{grad}\psi + \left(q\varphi - \frac{\hbar q}{2mc\mathrm{i}}\operatorname{div}\mathfrak{A} + \frac{q^2}{2mc^2}\,\mathfrak{A}^2\right)\psi = 0\,. \tag{37}$$

Diese Gleichung kann man in der etwas übersichtlicheren Form

$$\boxed{\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\right)^2\psi + q\varphi\psi = 0} \tag{38}$$

schreiben, wenn man beim Ausmultiplizieren des mittleren Gliedes darauf achtet, daß ∇ auch auf $\mathfrak{A}$ anzuwenden ist:

$$\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\right)^2\psi = -\hbar^2\Delta\psi - \frac{\hbar q}{\mathrm{i}c}(\nabla\mathfrak{A})\psi - 2\frac{\hbar q}{\mathrm{i}c}\,\mathfrak{A}\nabla\psi + \frac{q^2}{c^2}\,\mathfrak{A}^2\psi\,. \tag{39}$$

In 1.2 § 5a sahen wir, daß die elektromagnetischen Potentiale $\mathfrak{A}$ und φ nur bis auf Eichtransformationen

$$\begin{aligned} \mathfrak{A} &\to \mathfrak{A}' = \mathfrak{A} - \operatorname{grad} u\,,\\ \varphi &\to \varphi' = \varphi + \frac{1}{c}\frac{\partial u}{\partial t} \end{aligned} \tag{40}$$

definiert sind. Führt man neben dieser Transformation der Potentiale eine „Phasentransformation" des SCHRÖDINGER-Feldes

$$\psi \to \psi' = \psi\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{q}{c}u} \tag{41}$$

aus, so überzeugt man sich durch Einsetzen in Gl. (38), daß *die* SCHRÖDINGER*sche Feldgleichung gegenüber dieser kombinierten Phasen-Eich-Transformation invariant ist:* Wenn Gl. (38) in den ungestrichenen Feldgrößen erfüllt ist, so gilt sie auch in den gestrichenen Größen. Auch die physikalischen Observablen des SCHRÖDINGER-Feldes (Kap. 1.4) sind gegen solche Transformationen invariant (vgl. Aufg. 14).

Wie in § 1 schon ausführlich dargelegt wurde, ist die SCHRÖDINGER-Gleichung als *klassische Feldgleichung* zu interpretieren, die die wellenförmige Ausbreitung z. B. von Elektronen wiedergibt. Es muß daher möglich sein, die Größe $\hbar$ — die in der Herleitung der Gleichung als Bindeglied zwischen Teilchen- und Wellenbild hereinkommt [Gl. (15)] — wieder zu eliminieren, so daß in (38) nur mehr solche Größen auftreten, die rein im Wellenbild interpretierbar sind. Definiert

man in Fortführung von Gl. (11) durch

$$\frac{m}{\mu} = \frac{q}{\gamma} = \hbar \tag{42}$$

zwei Konstanten μ und γ, so ist es in der Tat möglich, die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (38) in der Form

$$\frac{1}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2\mu}\left(\frac{\nabla}{\mathrm{i}} - \frac{\gamma}{c}\,\mathfrak{A}\right)^2 \psi + \gamma \varphi \psi = 0 \tag{43}$$

zu schreiben, in der die Größen μ und γ ohne Bezug auf die punktmechanischen Begriffe Masse und Ladung als reine Eigenschaften des Feldes interpretiert werden können. Wie schon in § 2 gezeigt wurde, bestimmt μ die Dispersion der freien Materiewellen. Die jetzt noch hinzugekommene Größe γ charakterisiert die Kopplung zwischen Materiefeld und elektromagnetischem Feld und ist z. B. aus der Ablenkung von Materiewellen im elektrischen Feld bestimmbar. — Der in Gl. (42) zum Ausdruck gebrachte Zusammenhang zwischen den Feldgrößen μ, γ und den Partikelgrößen m, q über das Wirkungsquantum $\hbar$ ist bereits eine Aussage der das Teilchen- und Wellenbild vereinenden Quantentheorie.

§ 6. Übersetzungsschema für den Übergang vom Teilchen- zum Wellenbild

Vergleicht man die SCHRÖDINGERschen Feldgleichungen (32) bzw. (38) mit den entsprechenden HAMILTON-JACOBIschen Gleichungen (20) bzw. (34) eines Teilchens, so sieht man, daß man den Übergang von der NEWTONschen Teilchenmechanik zur SCHRÖDINGERschen Wellenmechanik erhält, wenn man die formalen Ersetzungen

$$\boxed{\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial t} \\ p_k &= +\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x_k} \end{aligned}} \tag{44}$$

durchführt und den entstehenden Differentialoperator auf die Feldamplitude ψ anwendet,

$$\boxed{H\left(x_k, p_k = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x_k}, t\right) \psi = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial t}}\,. \tag{45}$$

So folgt z. B. aus $H = \frac{1}{2m} \sum\limits_k p_k^2 + V(\mathfrak{r})$ der Differentialoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} + V(\mathfrak{r}),$$

so daß Gl. (45) tatsächlich auf die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (32) führt. Entsprechend liefert die Ersetzung (44) in der HAMILTON-Funktion (33) die Materiefeldgleichung (38).

Viertes Kapitel

Die Observablen des Schrödingerschen Materiefeldes

Ebenso wie aus den MAXWELLschen Gleichungen Erhaltungssätze für Energiedichte und -strömung sowie Impulsdichte und -strömung des elektromagnetischen Feldes folgen, lassen sich auch aus der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung *Erhaltungssätze* ableiten, die zur Definition entsprechender Dichten und Ströme des Materiefeldes führen und damit das SCHRÖDINGER-Feld mit physikalischen Eigenschaften beleben.[1])

§ 1. Dichte und Strom des Materiefeldes

Die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (1.3–32) bzw. (1.3–38) besitzt gegenüber den MAXWELLschen Gleichungen die Eigenart, daß sie *wesentlich komplex* ist, d. h., da in ihr komplexe Koeffizienten auftreten, sind auch ihre Lösungen $\psi(\mathfrak{r}, t)$ komplexwertig.[2]) Die Feldfunktion $\psi(\mathfrak{r}, t)$ ist also gar nicht unmittelbar meßbar, man muß vielmehr aus ψ in geeigneter Weise reelle Größen aufbauen, für die eine direkte physikalische Deutung möglich wird.

Zerlegt man das Feld in Real- und Imaginärteil, $\psi = \psi_1 + \mathrm{i}\psi_2$, so stellt die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (1.3–32) ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem

$$\left.\begin{aligned} \hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_1 + V\psi_1 = 0, \\ \hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_2 - V\psi_2 = 0 \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

für das „zweikomponentige Feld" (ψ_1, ψ_2) dar.

Wie wir bereits aus der Herleitung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung wissen, stellt die *Kontinuitätsgleichung* für die Materie einen Teil ihrer Aussage dar. Wir wollen diese jetzt noch in einer etwas anderen Form anschreiben. Dazu gehen wir von der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung und ihrer konjugiert-komplexen Form aus,

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi = 0, \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V\psi^* = 0, \tag{2*}$$

---

[1]) Im Gegensatz zu den elektromagnetischen Feldstärken, die unmittelbar durch die LORENTZ-Kraft auf eine Probeladung definiert sind, existiert für die SCHRÖDINGERsche Materiefeldstärke ψ keine solche direkte physikalische Definition (vgl. auch Kap. 4.6).

[2]) Die in der Elektrodynamik häufig verwendete komplexe Rechnung ist demgegenüber nur ein Rechentrick: Dort werden die reellen Feldfunktionen in eine komplexe FOURIER-Reihe entwickelt, da in ihr die Rechenoperationen leichter überschaubar sind als im Reellen.

multiplizieren die erste mit $\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\psi^*$, die zweite mit $-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\psi$ und addieren beide:

$$\frac{\partial\psi^*\psi}{\partial t}+\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\,(\psi^*\,\Delta\psi-\psi\,\Delta\psi^*)=0. \tag{3}$$

Der Term in Klammern läßt sich auch schreiben $\operatorname{div}(\psi^*\operatorname{grad}\psi-\psi\operatorname{grad}\psi^*)$, wodurch sich wieder die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\operatorname{div}\mathfrak{i}=0 \tag{4}$$

ergibt. Die *Dichte* ϱ und die *Stromdichte* $\mathfrak{i}$ *des Materiefeldes* sind damit gegeben durch

$$\boxed{\begin{aligned}\varrho&=C\psi^*\psi\\ \mathfrak{i}&=C\,\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\,(\psi^*\operatorname{grad}\psi-\psi\operatorname{grad}\psi^*)\end{aligned}}\,, \tag{5}$$

wobei über die Konstante C noch in geeigneter Weise verfügt werden kann.

Integriert man die Kontinuitätsgleichung über den gesamten Raum, so erhält man unter Verwendung des GAUSSschen Satzes

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\limits_{\infty}\varrho\,\mathrm{d}^3x+\oint\limits_{\infty}\mathfrak{i}\,\mathrm{d}\mathfrak{f}=0. \tag{6}$$

Stellt man die Forderung, daß durch eine unendlich ferne Kugel kein Strom tritt, so verschwindet das Oberflächenintegral, und man erhält die Aussage, daß das Integral $\int\varrho\,\mathrm{d}^3x$, das ein Maß für die gesamte betrachtete Materiemenge ist, konstant bleibt (*Erhaltung der Materie*):

$$\boxed{\int\limits_{\infty}\psi^*(\mathfrak{r},t)\,\psi(\mathfrak{r},t)\,\mathrm{d}^3x=N=\text{const}}\,. \tag{7}$$

Der Wert N dieses Integrals wird durch die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung nicht festgelegt, weil wegen der Homogenität der Gleichung mit ψ auch $a\psi$ (a beliebige, komplexe Konstante) Lösung ist. Setzt man N willkürlich fest, so wird dadurch der Betrag von a bestimmt. Die *Dimension* von ψ ist mit jener von N korreliert,

$$\dim\psi=(\dim N)^{1/2}\,(\text{Länge})^{-3/2}. \tag{8}$$

Wählt man N dimensionslos, so ergibt sich die Dimension von ψ zu $(\text{Länge})^{-3/2}$.

Interpretiert man ϱ als *Massendichte*, so ist $\int\varrho\,\mathrm{d}^3x=M$ die Gesamtmasse des betrachteten Materiefeldes, und man erhält für die Konstante C die Beziehung

$$C=\frac{M}{N}. \tag{9a}$$

Ist das Materiefeld insbesondere *geladen*, so kann man ϱ auch als Dichte der elektrischen Ladungsverteilung auffassen, wenn man für C setzt

$$C = \frac{Q}{N}, \tag{9b}$$

wobei $Q = \int\limits_{\infty} \varrho \, d^3x$ dann die *Gesamtladung* des Materiefeldes bedeutet.

Die durch die Wellengleichung nicht festgelegte Größe N beschreibt die „*Gesamtintensität*" des Materiefeldes. Man kann vermuten, daß diese Größe im Teilchenaspekt die *Anzahl der Teilchen* angibt, die in dem Feld „enthalten" sind. Dies ergibt sich in der Tat, wenn man das Materiefeld quantisiert (vgl. Kap. 4.6). Machen wir von diesem quantenfeldtheoretischen Ergebnis schon jetzt Gebrauch, so können wir die Größen M/N bzw. Q/N als die Masse bzw. Ladung *eines* Teilchens interpretieren,

$$\frac{M}{N} = m, \quad \frac{Q}{N} = q. \tag{10}$$

Für ein geladenes Materiefeld, das unter dem Einfluß eines elektromagnetischen Feldes steht, liefert die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (1.3-38) bei analogem Vorgehen eine Kontinuitätsgleichung, aus der sich für Dichte und Strom die Ausdrücke

$$\boxed{\begin{aligned} \varrho_{\text{el}} &= q\psi^*\psi, \\ \mathfrak{i}_{\text{el}} &= \frac{q}{2m}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{q}{c}\mathfrak{A}\right)\psi - \psi\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla + \frac{q}{c}\mathfrak{A}\right)\psi^*\right] \\ &= \frac{q\hbar}{2m\mathrm{i}}(\psi^* \operatorname{grad}\psi - \psi \operatorname{grad}\psi^*) - \frac{q^2}{mc}\mathfrak{A}\psi^*\psi \end{aligned}} \tag{11}$$

ergeben.

Aufg. 14: Man beweise die Gleichungen (11) und zeige ihre Invarianz gegenüber der kombinierten Phasen-Eich-Transformation.

§ 2. Grenzbedingungen für das Materiefeld

Die im vorangehenden Paragraphen angestellten Überlegungen führen unmittelbar zu den Grenz- oder Randbedingungen, die das Materiefeld erfüllen muß: Es können nur solche Funktionen $\psi(\mathfrak{r}, t)$ als physikalisch realisierbare Lösungen verwendet werden, die einerseits *eindeutig* sind und für die andererseits gemäß Gl. (7) das Raumintegral über $|\psi|^2$ existiert; *die Wellenfunktionen* $\psi(\mathfrak{r}, t)$ *müssen quadratintegrabel sein*. Da der radiale Anteil dieses Integrals $\int\limits_0^\infty |\psi|^2 r^2 \, dr$ lautet, ist es zur Konvergenz an der oberen Grenze notwendig, daß ψ *im Unendlichen verschwindet*, und zwar muß $|\psi|$ stärker als $r^{-3/2}$ Null werden. Das Verschwinden von ψ im Unendlichen garantiert auch, daß die im vorangehenden Abschnitt aufgestellte Forderung, wonach durch eine unendlich ferne Kugel kein Strom treten soll, erfüllt ist, weil dann nach Gl. (5) dort $\mathfrak{i}$ verschwindet.

Bei Streuprozessen gibt es Partikularlösungen der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung (Kap. 1.5), die im Unendlichen nicht verschwinden und daher nicht quadratintegrabel sind. Solche Lösungen stellen eine Abstraktion von der physikalischen Realität dar. Bei einer das reale Verhalten beschreibenden Formulierung ist es nötig, der endlichen Länge der Wellenzüge Rechnung zu tragen und solche Linearkombinationen von Partikularlösungen zu betrachten, die ein Wellenpaket $\psi(\mathfrak{r}, t)$ liefern, das im Unendlichen verschwindet.

Zur rechnerischen Vereinfachung mancher Probleme ist es zweckmäßig, auch *unstetige* Veränderungen des Potentials $V(\mathfrak{r})$ längs einer Fläche zuzulassen. Springt bei der Überschreitung einer solchen Unstetigkeitsfläche das Potential vom Wert V_1 auf den Wert V_2 (Fig. 14), so stellt dies eine sinnvolle Abstraktion für Probleme dar, bei denen der Anstieg des tatsächlichen Potentials auf einer Strecke erfolgt, die kleiner als die Materiewellenlänge ist. Wie sind im Falle eines solchen Potentialsprungs die Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 auf den beiden Seiten der Unstetigkeitsfläche aneinanderzuschließen? Die Antwort hierauf liefert die Kontinuitätsgleichung, wenn man sie auf das Raumgebiet anwendet, das durch eine Hüllfläche um ein Stück der Unstetigkeitsfläche abgegrenzt wird (Fig. 14). Bekanntlich geht dabei die räumliche Divergenz $\operatorname{div} \mathfrak{i}$ in die Flächendivergenz $\operatorname{Div} \mathfrak{i} = \mathfrak{n}(\mathfrak{i}_2 - \mathfrak{i}_1)$ ($\mathfrak{n}$ = Flächennormale) über. Wenn man Flächenladungen ausschließt, folgt dann aus der Kontinuitätsgleichung

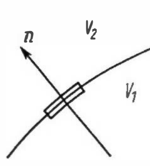


Fig. 14. Unstetigkeitsfläche des Potentials

$$\boxed{\operatorname{Div} \mathfrak{i} = 0}\,. \tag{12}$$

Diese, die Stetigkeit der Normalkomponente des Stromes darstellende Gleichung ist nach Gl. (5) sicher erfüllt, falls die Wellenfunktion ψ und ihre Ableitung $\frac{\partial \psi}{\partial n}$ (in Richtung der Normalen der Unstetigkeitsfläche von V) stetig sind,

$$\boxed{\psi_1 = \psi_2; \quad \left(\frac{\partial \psi}{\partial n}\right)_1 = \left(\frac{\partial \psi}{\partial n}\right)_2}\,. \tag{13}$$

Liegt — bei einem eindimensionalen Problem — längs einer kleinen Strecke ($<\lambda$) ein sehr hoher Potentialwall vor, so kann man diesen Sachverhalt durch ein Potential der Gestalt

$$V(x) = V_0(x) + \hat{V} \cdot \delta(x - \hat{x}) \tag{14}$$

approximieren (Fig. 15). Dabei ist $V_0(x)$ ein stetig veränderliches Potential, dem durch den zweiten Summanden eine δ-artige Singularität (Kap. 5.1) an der Stelle $\hat{x}$ überlagert ist. Die Konstante $\hat{V}$ beschreibt die Stärke des δ-Zackens und hat die Dimension (Energie $\times$ Länge). Das Verhalten der Wellenfunktion rechts und links von der Unstetigkeitsstelle erhält man am einfachsten, wenn man die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung über eine Strecke $1 \cdots 2$ integriert,

die die Unstetigkeitsstelle umfaßt,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\int_1^2 \psi\,dx - \frac{\hbar^2}{2m}\int_1^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\,dx + \int_1^2 V\psi\,dx = 0.$$

Wenn wir versuchen, mit stetigem ψ auszukommen, verschwindet bei immer kleiner werdendem Integrationsgebiet das erste Integral und vom letzten Integral der Beitrag von V_0. Die restlichen Terme ergeben

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_2 - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_1\right] + \hat{V}\int_1^2 \delta(x-\hat{x})\,\psi(x)\,dx = 0$$

oder

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_2 - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_1\right] = \hat{V}\psi(\hat{x}).$$

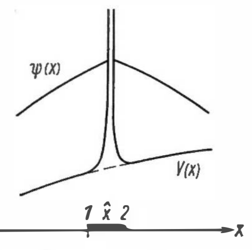


Fig. 15. δ-artiges Potential

Die Grenzbedingungen lauten somit

$$\boxed{\psi_1 = \psi_2 = \psi(\hat{x}), \quad \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_2 - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_1 = \frac{2m}{\hbar^2}\hat{V}\psi(\hat{x})}, \tag{15}$$

d. h., die Wellenfunktion ist stetig, aber sie hat an der Stelle $\hat{x}$ einen Knick nach Maßgabe von $\hat{V}$. Diese Grenzbedingungen stellen ein sehr bequemes Mittel dar, um die Beeinflussung der Wellenfunktion durch dünne, aber sehr hohe Potentialschwellen einfach zu erfassen. Beispiele hierfür werden wir in den Aufg. 18 bis 20 kennenlernen.

§ 3. Energiedichte und Energieströmung des Materiefeldes

Beim elektromagnetischen Feld haben die Ausdrücke

$$w = \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{B}^2), \quad \mathfrak{S} = \frac{c}{4\pi}(\mathfrak{E}\times\mathfrak{B}) \tag{16}$$

die Bedeutung von Energiedichte und Energieströmung. Um entsprechende Beziehungen für das SCHRÖDINGERsche Materiefeld herzuleiten, multiplizieren wir die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (2) mit $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$, die konjugiert komplexe Gleichung (2*) mit $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ und addieren die entsprechenden Gleichungen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\Delta\psi + \frac{\partial\psi}{\partial t}\Delta\psi^*\right) + V(\mathfrak{r})\frac{\partial\psi^*\psi}{\partial t} = 0. \tag{17}$$

Für den in Klammern stehenden Ausdruck kann man schreiben

$$\operatorname{div}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\operatorname{grad}\psi + \frac{\partial\psi}{\partial t}\operatorname{grad}\psi^*\right) - \frac{\partial}{\partial t}(\operatorname{grad}\psi^*\operatorname{grad}\psi),$$

so daß man eine Gleichung der Gestalt

$$\operatorname{div}\mathfrak{s} + \frac{\partial w}{\partial t} = 0 \tag{18}$$

erhält, wenn man setzt

$$\boxed{\begin{aligned} w &= \frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{grad} \psi^* \operatorname{grad} \psi + V \psi^* \psi, \\ \mathfrak{s} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \operatorname{grad} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \operatorname{grad} \psi^* \right) \end{aligned}} . \tag{19}$$

Wegen der Bedeutung von $\psi^*\psi$ als Dichte der Materie stellt der Term $V\psi^*\psi$ die Dichte der potentiellen Energie des Materiefeldes dar. Man wird daher $\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{grad} \psi^* \operatorname{grad} \psi$ als Dichte der kinetischen Energie und w als gesamte *Energiedichte* interpretieren. Die Gl. (18) bedeutet die differentielle Energiebilanz des Materiefeldes, in der $\mathfrak{s}$ als Dichte der *Energieströmung* aufzufassen ist.

Integriert man Gl. (18) über den ganzen Raum, so erhält man bei Verwendung des GAUSSschen Satzes die Konstanz der *Gesamtenergie* W,

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int w \, \mathrm{d}^3x = 0 \tag{20}$$

(Energieerhaltung).[1]) Mit Hilfe des GREENschen Satzes[2]) läßt sich die Gesamtenergie des SCHRÖDINGER-Feldes auch schreiben

$$\boxed{W = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r}) \right] \psi \, \mathrm{d}^3x = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \, \mathrm{d}^3x} . \tag{21}$$

Dabei wurde in der ersten Gleichung das Verschwinden von ψ im Unendlichen benutzt, so daß das Oberflächenintegral im GREENschen Satz Null wird. Die zweite Gleichung folgt dann bei Heranziehung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung.

§ 4. Schwerpunkt, Impuls und Drehimpuls des Materiefeldes

Es ist naheliegend, den *Schwerpunkt* des Materiefeldes durch

$$\boxed{\mathfrak{R}(t) \equiv \frac{1}{N} \int \psi^*(\mathfrak{r}, t) \, \mathfrak{r} \psi(\mathfrak{r}, t) \, \mathrm{d}^3x} \tag{22}$$

zu definieren. Die zeitliche Veränderung dieses Vektors

$$\dot{\mathfrak{R}} = \frac{1}{N} \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \mathfrak{r} \psi + \psi^* \mathfrak{r} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \mathrm{d}^3x$$

---

[1]) Wesentliche Voraussetzung für die Gültigkeit dieser Gleichung ist, daß das Potential V zeitunabhängig gewählt wurde. Ist $V = V(\mathfrak{r}, t)$, so ergibt sich wie in der Mechanik, daß die Änderung der Energie W durch $\partial V/\partial t$ bestimmt wird.

[2]) Setzt man im GAUSSschen Satz $\int \operatorname{div} \mathfrak{v} \, \mathrm{d}^3x = \oint \mathfrak{v} \, \mathrm{d}\mathfrak{f}$ für den Vektor $\mathfrak{v} = u \operatorname{grad} v$, so ergibt sich

$$\int \operatorname{grad} u \operatorname{grad} v \, \mathrm{d}^3x + \int u \, \Delta v \, \mathrm{d}^3x = \oint u \operatorname{grad} v \, \mathrm{d}\mathfrak{f} \quad \text{(GREEN)}.$$

wird durch die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung bestimmt. Dazu multiplizieren wir Gl. (2) mit $\psi^* \mathfrak{r}$, Gl. (2*) mit $-\psi\mathfrak{r}$ und erhalten nach Addition

$$\dot{\mathfrak{R}} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}N} \int (\psi \mathfrak{r}\, \Delta\psi^* - \psi^* \mathfrak{r}\, \Delta\psi)\, \mathrm{d}^3x. \tag{23}$$

Dieses Integral läßt sich noch umformen, wenn man die Vektoridentität

$$\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\psi^* \mathfrak{r}\, \frac{\partial\psi}{\partial x_i}\right) = \sum_i \frac{\partial\psi^*}{\partial x_i}\, \mathfrak{r}\, \frac{\partial\psi}{\partial x_i} + \psi^* \operatorname{grad}\psi + \psi^* \mathfrak{r}\, \Delta\psi \tag{24}$$

beachtet. Integriert über den ganzen Raum, wird auf der linken Seite das Oberflächenintegral $\oint \psi^* \mathfrak{r} (\operatorname{grad}\psi\, \mathrm{d}\mathfrak{f}) = 0$, so daß nach Subtraktion der zu Gl. (24) konjugiert komplexen Gleichung aus Gl. (23) folgt

$$\dot{\mathfrak{R}} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}N} \int (\psi^* \operatorname{grad}\psi - \psi \operatorname{grad}\psi^*)\, \mathrm{d}^3x. \tag{25}$$

Berücksichtigt man weiterhin

$$\int (\psi^* \operatorname{grad}\psi + \psi \operatorname{grad}\psi^*)\, \mathrm{d}^3x = \int \operatorname{grad}(\psi^*\psi)\, \mathrm{d}^3x = \oint_\infty \psi^*\psi\, \mathrm{d}\mathfrak{f} = 0, \tag{26}$$

so ergibt sich

$$\dot{\mathfrak{R}} = \frac{\hbar}{mN\mathrm{i}} \int \psi^* \operatorname{grad}\psi\, \mathrm{d}^3x. \tag{27}$$

Diese Gleichung legt es nahe, als gesamten *Impuls* des Feldes zu definieren

$$\boxed{\mathfrak{P}(t) \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \psi^* \operatorname{grad}\psi\, \mathrm{d}^3x}\,,^{1)} \tag{28}$$

weil dann wie in der Mechanik *die zeitliche Veränderung des Schwerpunktes durch den Feldimpuls gegeben ist,*

$$\boxed{M\dot{\mathfrak{R}} = \mathfrak{P}} \qquad (M = Nm). \tag{29}$$

Man kann sich nun die Frage vorlegen, wie sich der durch Gl. (28) definierte Impuls zeitlich verändert. Unter Benutzung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung erhält man (Aufg. 15)

$$\boxed{\dot{\mathfrak{P}} = -\int \psi^* \operatorname{grad} V \cdot \psi\, \mathrm{d}^3x \equiv \mathfrak{K}} \tag{30}$$

d. h., *die Änderung des Gesamtfeldimpulses ist gegeben durch das Integral über die Kraftdichte.* Nennen wir dieses Integral die gesamte von außen auf das Feld wirkende Kraft $\mathfrak{K}$, so haben wir völlige Analogie zum NEWTONschen Gesetz der Mechanik erreicht.

Durch die Definition des Impulses wird es nahegelegt, den *Gesamtdrehimpuls* des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes durch

$$\boxed{\mathfrak{L} \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \psi^* \mathfrak{r} \times \operatorname{grad}\psi\, \mathrm{d}^3x} \tag{31}$$

[1]) Wegen Gl. (26) gilt $\mathfrak{P} - \mathfrak{P}^* = 0$, d. h. $\mathfrak{P}$ ist reell.

zu definieren. Er ist das Integral über eine Drehimpulsdichte. Die Größe $\mathfrak{L}$ ist ebenso wie der Drehimpuls der Mechanik von der Wahl des Ursprungs von $\mathfrak{r}$ abhängig. Mit Hilfe der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung läßt sich wieder zeigen, daß gilt

$$\boxed{\dot{\mathfrak{L}} = -\int \psi^* (\mathfrak{r} \times \operatorname{grad} V)\, \psi\, d^3x \equiv \mathfrak{M}}\,, \tag{32}$$

d. h., *die zeitliche Veränderung des Drehimpulses ist durch das Integral über die Momentendichte gegeben* (*Drehimpulssatz*).

Die bisher mehr oder weniger ad hoc eingeführten Bezeichnungen der Observablen des Feldes, wie Impuls, Energie, Drehimpuls und Schwerpunkt, lassen sich ebenso wie die entsprechenden Größen der Mechanik (1.2 § 3) aus dem Transformationsverhalten gegenüber Raum- und Zeittranslationen, Drehungen und GALILEI-Transformationen begründen. Eine detaillierte Darstellung dieses Sachverhaltes geben wir in 1.7 § 4. *Erst diese gemeinsame Wurzel der Observablen des Teilchen- und Wellenbildes rechtfertigt die Verwendung gleicher Namen für Ausdrücke, die durch völlig verschiedene Realisierungen zustande kommen.*

Aufg. 15: Man beweise die Gln. (30) und (32) und zeige, daß der Felddrehimpuls $\mathfrak{L}$ eine reelle Größe ist.

Fünftes Kapitel

Lösungen der Schrödingerschen Materiefeldgleichung

§ 1. Superposition stationärer Lösungen

Um Partikularlösungen der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\mathfrak{r})\, \psi = 0 \tag{1}$$

zu gewinnen, gehen wir mit dem Produktansatz

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = u(\mathfrak{r})\, T(t) \tag{2}$$

in Gl. (1) ein und erhalten nach Division mit ψ

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\dot{T}}{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta u}{u} + V(\mathfrak{r}) = \text{const.}$$

Da nach der ersten Gleichung eine reine Funktion der Zeit gleich einer reinen Funktion des Ortes sein soll, ist es notwendig, daß diese Ausdrücke konstant, d. h. unabhängig von $\mathfrak{r}$ und t sind. Die Separationskonstante nennen wir $\hbar\omega$ und erhalten damit für die Zeitfunktion

$$\dot{T} + i\omega T = 0, \quad \text{d. h.} \quad T(t) = e^{-i\omega t}, \tag{3}$$

und für die Ortsabhängigkeit die Differentialgleichung

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + V u = \hbar \omega u. \tag{4}$$

Für die Energie der Partialwelle (2) erhält man nach Gl. (1.4–21)

$$W = - \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \, \mathrm{d}^3x = \hbar \omega \int \psi^* \psi \, \mathrm{d}^3x = N \hbar \omega. \tag{5}$$

Nach denselben Überlegungen, die zu den Gl. (1.4–10) führten, können wir die Größe *W/N auf die Sprache des Partikelbildes abbilden und dort als Energie E eines Teilchens interpretieren.* Damit erhalten wir wieder die DE BROGLIEsche Relation zwischen Frequenz ω und Teilchenenergie E,

$$E = \hbar \omega. \tag{6}$$

Die Separationskonstante muß also reell sein; die Lösung (3) ist eine zeitlich periodische Funktion.[1])

Die Differentialgleichung (4) für die räumliche Verteilung $u(\mathfrak{r})$ des Materie feldes nennt man die *zeitunabhängige* SCHRÖDINGER-*Gleichung*

$$\boxed{\left[- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r})\right] u_E(\mathfrak{r}) = E u_E(\mathfrak{r})}. \tag{7}$$

Ihre Lösungen $u_E(\mathfrak{r})$ hängen von der speziellen Gestalt des Potentials $V(\mathfrak{r})$ ab. Die Grenzbedingungen (1.4 § 2), die das Materiefeld erfüllen muß, schränken bei gegebenem Potential die möglichen Lösungen $u_E(\mathfrak{r})$ weiter ein.[2]) Wie wir noch anschaulich klarmachen werden (§ 4), gibt es im allgemeinen nicht für jeden Wert von ω bzw. E eine Lösung. Jene Werte ω bzw. E, für die eine Lösung $u_E(\mathfrak{r})$ möglich ist, nennt man *Eigenfrequenzen* bzw. *Eigenwerte der Energie.* Die zugehörigen Lösungen $u_E(\mathfrak{r})$ heißen *Eigenfunktionen* der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung.[3])

Wird die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung (7) bei fester Energie E durch mehrere Eigenfunktionen $u_E^\mu(\mathfrak{r})$, ($\mu = 1, \ldots, t_E$) befriedigt, die sich nicht bloß um konstante Faktoren unterscheiden, so nennt man den Eigenwert E *entartet,* und zwar t_E-fach, wenn es t_E *un*abhängige Eigenfunktionen $u_E(\mathfrak{r})$ gibt. Wegen der Linearität der Differentialgleichung (7) ist dann mit u_E^μ auch jede Linearkombination

$$u_E(\mathfrak{r}) = \sum_{\mu=1}^{t_E} c^\mu u_E^\mu(\mathfrak{r}) \tag{8}$$

---

[1]) Die *komplexe* Zeitabhängigkeit (3) ist wesentlich; sin ωt oder cos ωt sind keine Lösungen!

[2]) Die stets vorhandene, triviale Lösung $u \equiv 0$ interessiert natürlich nicht.

[3]) Daß die Grenzbedingungen nur ganz bestimmte Schwingungsformen erlauben, ist eine allgemeine Eigenschaft des Wellenbildes; sie tritt z. B. auch bei elektromagnetischen Wellen in Hohlleitern auf.

mit willkürlichen Konstanten c^μ ebenfalls eine Lösung von Gl. (7), d. h. eine Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert E. (Ein Beispiel hierfür werden wir gleich im § 2 kennenlernen.)

Die gemäß Gl. (2) aus den Eigenfunktionen $u_E(\mathfrak{r})$ gebildeten Lösungen der zeitabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung (1)

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = u_E(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{9}$$

nennt man *stationär*, weil die damit berechneten Observablen des Feldes (Kap. 1.4) zeitunabhängig werden. Zum Beispiel ist die Dichte ϱ, proportional zu $|\psi(\mathfrak{r}, t)|^2 = |u_E(\mathfrak{r})|^2$, zeitlich konstant.[1])

Da die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (1) linear ist, sind auch alle Linearkombinationen von Partikularlösungen (9) mit willkürlichen von E abhängigen Koeffizienten

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \sum_E c_E u_E(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \int c(E)\, u_E(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE \tag{10}$$

ebenfalls Lösungen von (1). Die Summe läuft dabei über die nach (7) möglichen diskreten Werte von E, das Integral über die kontinuierlichen E-Werte. Wir schreiben dafür formal, die beiden Möglichkeiten zusammenfassend, die Kurzform [2])

$$\boxed{\psi(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_E c_E u_E(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE} \tag{10a}$$

oder, wenn wir die Entwicklung (8) einsetzen,

$$\boxed{\psi(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{E,\mu} c_E^\mu u_E^\mu(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE\, d\mu}\,, \tag{10b}$$

wobei auch der Fall eingeschlossen ist, daß der Entartungsindex μ der zeitunabhängigen Lösungen kontinuierliche Werte annehmen kann (vgl. § 2).

Die auf diese Weise aus den stationären Lösungen aufgebauten allgemeinen Lösungen der (zeitabhängigen) SCHRÖDINGERschen Feldgleichung sind *nicht stationär:* Die Observablen des Feldes, gebildet mit diesen Wellenfunktionen, sind im allgemeinen Funktionen der Zeit. Zum Beispiel beschreibt die zeitliche Veränderung der Dichte $\varrho(\mathfrak{r}, t)$ die *wellenmechanische Bewegung* einer räumlich verteilten Elektronenwolke.

---

[1]) Wenn eine Lösung stationär ist, braucht sie noch nicht normierbar, d. h. physikalisch realisierbar zu sein.

[2]) Man stoße sich nicht daran, daß in dieser zusammenfassenden Schreibweise im Fall kontinuierlicher Energiewerte die Variable E als Index steht!

Gehen wir etwa von zwei Eigenfunktionen $u_1(\mathfrak{r})$ und $u_2(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung (7) aus, die zu Energien E_1 und E_2 gehören, und betrachten wir die Linearkombination

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = u_1(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + u_2(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}, \tag{11}$$

die also Lösung von (1) ist. Ihre Dichteverteilung ist zeitlich periodisch,

$$|\psi(\mathfrak{r}, t)|^2 = |u_1|^2 + |u_2|^2 + 2\,|u_1 u_2| \cos\left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar}\, t - \alpha_1 + \alpha_2\right) \tag{12}$$

($u = |u|\, e^{i\alpha}$). Für $t = 0$ ist $|\psi(\mathfrak{r}, 0)|^2 = |u_1 + u_2|^2$, nach der halben Periode $t_1 = \frac{\hbar\pi}{E_1 - E_2}$ wird $|\psi(\mathfrak{r}, t_1)|^2 = |u_1 - u_2|^2$.

§ 2. Die kräftefreie Schrödingersche Feldgleichung

Wirken keine Kräfte auf das Materiefeld, so ist das Potential V konstant, und man kann durch geeignete Wahl des Energiebezugspunkts stets erreichen, daß diese Konstante Null wird. Damit geht die Differentialgleichung (7) in die Schwingungsgleichung

$$\Delta u_E + k^2 u_E = 0 \tag{13}$$

mit

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{14}$$

über. Die Energie kann alle Werte $E \geqq 0$ kontinuierlich annehmen (vgl. § 4).

Die Gleichung (13) besitzt Partikularlösungen

$$u_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{r}) = A\, e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}} \tag{15}$$

(entsprechend einem Produktansatz in x, y, z), wobei $\mathfrak{k}$ ein beliebiger Vektor vom Betrag k ist, d. h., alle Funktionen $u_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{r})$ mit Vektoren $\mathfrak{k}$, für die gilt $\mathfrak{k}^2 = 2mE/\hbar^2$, sind Eigenfunktionen zum Eigenwert E. Die Richtung von $\mathfrak{k}$ spielt die Rolle eines kontinuierlichen Entartungsindex, die Energie E ist ∞^2-fach entartet. Die Richtung von $\mathfrak{k}$ gibt die Ausbreitungsrichtung, sein Betrag $k = 2\pi/\lambda$ die Wellenlänge der *ebenen Materiewelle*

$$\psi_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{r}, t) = A\, e^{i(\mathfrak{k}\mathfrak{r} - \omega t)} \tag{16}$$

an. Diese Welle hat natürlich genau jene Eigenschaften, die wir in Kap. 1.3 zur Herleitung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung gefordert hatten: Einerseits ist Gl. (14) mit der dort postulierten Dispersion $\omega(k)$ identisch, andererseits liefert die Berechnung der in Kap. 1.4 gegebenen Größen für die ebene Welle (16) gerade Relationen, die dem in 1.3 § 2 entwickelten DE BROGLIEschen Konzept

entsprechen. Man erhält nämlich für die

$$\left.\begin{aligned}
&\text{Dichte} && \varrho = C\,|A|^2,\\
&\text{Stromdichte} && \mathfrak{i} = C\,\frac{\hbar}{m}\,\mathfrak{k}\,|A|^2,\\
&\text{Impulsdichte} && \mathfrak{p} = \hbar\mathfrak{k}\,|A|^2;\\
&\text{Drehimpulsdichte} && \mathfrak{l} = \hbar(\mathfrak{r}\times\mathfrak{k})\,|A|^2,\\
&\text{Energiedichte} && w = \hbar\omega\,|A|^2 = E\,|A|^2,\\
&\text{Energiestromdichte} && \mathfrak{s} = \frac{\hbar^2}{m}\,\omega\mathfrak{k}\,|A|^2 = \frac{\mathfrak{p}}{m}\,E.
\end{aligned}\right\} \quad (17)$$

Gl. (16) beschreibt also eine stationäre, räumlich konstante Materieverteilung mit Impuls- und Energiedichte.

Die ebene Welle (16) ist nicht quadratintegrabel, das Integral

$$\int_\infty |\psi_\mathfrak{k}|^2\,\mathrm{d}^3x = \int_\infty |u_\mathfrak{k}|^2\,\mathrm{d}^3x = |A|^2 \int_\infty \mathrm{d}^3x$$

divergiert. Für zwei Partikularlösungen mit verschiedenen Ausbreitungsvektoren $\mathfrak{k}'$ und $\mathfrak{k}$ ergibt die Integration

$$\int_\infty u^*_{\mathfrak{k}'}(\mathfrak{r})\,u_\mathfrak{k}(\mathfrak{r})\,\mathrm{d}^3x = |A|^2 \int_\infty \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathfrak{k}-\mathfrak{k}')\mathfrak{r}}\,\mathrm{d}^3x = |A|^2\,(2\pi)^3\,\delta(\mathfrak{k}-\mathfrak{k}') \qquad (18)$$

die DIRACsche δ-Funktion (vgl. Kap. 5.1). Für $\mathfrak{k} \neq \mathfrak{k}'$ ist das Integral also Null. In Anlehnung an die Vektorrechnung sagt man daher, die Funktionen $u_{\mathfrak{k}'}(\mathfrak{r})$ und $u_\mathfrak{k}(\mathfrak{r})$ sind *orthogonal* (vgl. Kap. 2.1).

Die allgemeine, zu einer bestimmten Energie E gehörige Lösung $u_E(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen Gleichung (13) ist eine Linearkombination von Partikularlösungen (15) mit Ausbreitungsvektoren $\mathfrak{k}$, die alle denselben Betrag k, aber verschiedene Richtungen besitzen. Wir erhalten sie nach Gl. (8), indem wir $\mathfrak{k}$-abhängige Amplituden $A(\mathfrak{k})$ vorgeben und über alle $\mathfrak{k}$-Richtungen integrieren,

$$u_E(\mathfrak{r}) = \int A(\mathfrak{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathfrak{k}\mathfrak{r}}\,\mathrm{d}\Omega_\mathfrak{k} \qquad (19)$$

($\mathrm{d}\Omega_\mathfrak{k}$ = räumlicher Winkel im $\mathfrak{k}$-Raum). Auch diese Funktionen sind nicht quadratintegrabel. Für die kräftefreien stationären Lösungen divergiert also z. B. die Gesamtmaterie oder die Gesamtladung des Feldes. *Diese Lösungen sind also sicher nicht in Strenge physikalisch realisierbar, d. h. die realen, kräftefreien Zustände müssen instationär sein.*

Die Bedeutung der nicht quadratintegrablen Eigenfunktionen (19) liegt darin, daß es möglich ist, aus ihnen die quadratintegrablen, nichtstationären Zustände aufzubauen: Die allgemeine Lösung $\psi(\mathfrak{r}, t)$ der kräftefreien, zeitabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi \qquad (20)$$

ist entsprechend Gl. (10) eine Linearkombination der stationären Lösungen mit willkürlichen Koeffizienten,

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \int\limits_0^\infty c(E)\, u_E(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\, dE, \tag{21}$$

wofür wir im vorliegenden Fall nach Gl. (14) u. (19) ein dreifaches Integral über den gesamten $\mathfrak{k}$-Raum erhalten,

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \int C(\mathfrak{k})\, e^{i\left(\mathfrak{k}\mathfrak{r} - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}\, d^3k. \tag{22}$$

Durch geeignete Wahl der Amplituden $C(\mathfrak{k})$ ist es damit möglich, *Wellenpakete* zu konstruieren, die im wesentlichen nur in einem endlichen $\mathfrak{r}$-Raumgebiet von Null verschieden sind und im Unendlichen genügend rasch verschwinden, so daß das Integral $\int |\psi|^2\, d^3x$ existiert. *Solche Wellenpakete sind keine stationären Lösungen* (vgl. § 3). Innerhalb ihrer räumlichen Ausdehnung lassen sich Wellenpakete, deren Entwicklungskoeffizienten $C(\mathfrak{k})$ nur in einem schmalen $\mathfrak{k}$-Bereich wesentlich von Null verschieden sind, durch eine stationäre, nicht quadratintegrable Eigenfunktion (16) annähern [vgl. Gl. (1.3-3)].

An dieser Stelle sei noch erwähnt, daß es für manche spezielle Probleme zweckmäßiger ist, nicht von den ebenen Wellen (15) auszugehen, sondern in solchen Koordinaten, die der Fragestellung angepaßt sind, Partikularlösungen von (13) durch Produktansatz aufzusuchen. Zum Beispiel erhält man (Aufg. 17) in Kugelkoordinaten als reguläre Partikularlösungen von Gl. (13) Produkte aus sphärischen BESSEL-Funktionen $j_l(kr)$ und Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ (vgl. 4.3 § 2)

$$u_{k,l}^m(\mathfrak{r}) = \text{const} \cdot j_l(kr)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi). \tag{23}$$

Die allgemeine Lösung der zeitunabhängigen Gleichung läßt sich dann als Linearkombination

$$u_E(\mathfrak{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^{-l} A_l^m j_l(kr)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) \qquad (A_l^m = \text{const}) \tag{24}$$

schreiben. Man kann dieselbe Funktion $u_E(\mathfrak{r})$ also in ganz verschiedener Weise darstellen, die Entwicklungen (19) und (24) sind zwei Beispiele hierfür.[1]) Die allgemeine Entwicklung der Lösung nach irgendeinem „vollständigen Orthogonalsystem" wird in § 7 besprochen.

Die Lösung der kräftefreien, zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung lautet somit in Kugelkoordinaten

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \int\limits_0^\infty \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^{-l} C_l^m(k)\, j_l(kr)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi)\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\, dk \tag{25}$$

mit willkürlichen, von k abhängigen Koeffizienten $C_l^m(k)$.

Aufg. 16: Man bestimme für zwei sich überlagernde ebene Wellen, die entgegengesetzte Ausbreitungsvektoren $\mathfrak{k}$, $-\mathfrak{k}$ und Amplituden A_+, A_- besitzen, die Dichten ϱ, w, $\mathfrak{i}$ und $\mathfrak{s}$.

Aufg. 17: In welche Differentialgleichungen separiert die Schwingungsgleichung (13) durch einen Produktansatz in Kugelkoordinaten?

[1]) Durch geeignete Wahl der A_l^m ist es daher etwa möglich, eine ebene Welle $e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}$ in die Gestalt (24) zu bringen (vgl. Aufg. 122).

§ 3. Die kräftefreie Bewegung eines Materiefeldes

Das Materiefeld sei zur Zeit $t = 0$ durch eine bestimmte Feldverteilung $\psi(\mathfrak{r}, 0)$ gegeben. Wie sieht die Feldverteilung $\psi(\mathfrak{r}, t)$ zu einem späteren Zeitpunkt aus, wenn keine äußeren Kräfte wirksam sind? Die Antwort hierauf liefert die allgemeine Lösung (22) der kräftefreien, zeitabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung,

$$\boxed{\psi(\mathfrak{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int c(\mathfrak{k})\, e^{i\left(\mathfrak{k}\mathfrak{r} - \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right)}\, d^3k}, \tag{26}$$

in der wir die Koeffizienten durch $C(\mathfrak{k}) = (2\pi)^{-3/2} c(\mathfrak{k})$ ersetzten.

Für $t = 0$ nimmt diese Funktion die Gestalt

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int c(\mathfrak{k})\, e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}\, d^3k \tag{27}$$

an; d. h., die Entwicklungskoeffizienten $c(\mathfrak{k})$ sind die FOURIER-Transformierten der vorgegebenen Feldverteilung $\psi(\mathfrak{r}, 0)$. Nach dem FOURIERschen Theorem berechnen sich die Amplituden der Partialwellen aus

$$c(\mathfrak{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(\mathfrak{r}, 0)\, e^{-i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}\, d^3x. \tag{28}$$

Setzt man dieses Ergebnis in Gl. (26) ein, so erhält man

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint \psi(\mathfrak{r}', 0)\, e^{i\left[\mathfrak{k}(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}') - \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right]}\, d^3k\, d^3x'. \tag{29}$$

Dieses Ergebnis, das also die Berechnung des gesuchten Feldes $\psi(\mathfrak{r}, t)$ bei bekanntem $\psi(\mathfrak{r}, 0)$ erlaubt, schreiben wir in der Form

$$\boxed{\psi(\mathfrak{r}, t) = \int U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t)\, \psi(\mathfrak{r}', 0)\, d^3x'}, \tag{30}$$

wobei die Funktion

$$U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\left[\mathfrak{k}(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}') - \frac{\hbar}{2m} k^2 t\right]}\, d^3k \tag{31}$$

noch explizit ausgewertet werden kann.

Dazu beachten wir zunächst, daß die Funktion $U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t)$ wegen der Exponentialfunktion Produkt dreier gleicher Funktionen ist, die sich nur in der Bezeichnung der unabhängigen Variablen unterscheiden,

$$U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t) = U(x, x'; t)\, U(y, y'; t)\, U(z, z'; t). \tag{32}$$

Es genügt also

$$U(x, x'; t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left[k_x(x-x') - \frac{\hbar}{2m} k_x^2 t\right]}\, dk_x \tag{33}$$

zu berechnen. Mittels quadratischer Ergänzung erhalten wir

$$U(x, x'; t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\mathrm{i}\,\frac{\hbar t}{2m}\left[\left(k_x - \frac{m}{\hbar}\,\frac{x-x'}{t}\right)^2 - \left(\frac{m}{\hbar}\right)^2\left(\frac{x-x'}{t}\right)^2\right]\right\} \mathrm{d}k_x,$$

woraus nach Einführung der neuen Integrationsvariablen

$$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}}\left[k_x - \frac{m}{\hbar}\,\frac{x-x'}{t}\right]$$

folgt

$$U(x, x', t) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar t}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma^2}\, \mathrm{d}\sigma .$$

Das noch auftretende FRESNELsche Integral hat den Wert $\sqrt{\pi/\mathrm{i}}$ [1]), so daß man erhält

$$\boxed{U(x, x'; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}}}\,\frac{1}{\sqrt{t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t}}\ {}^{2)}.} \tag{34}$$

Für $t \to 0$ muß wegen Gl. (30) diese Funktion zur δ-Funktion werden. Mit $\varepsilon = 2\hbar t/m$ erhalten wir damit die Darstellung der δ-Funktion

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\mathrm{i}\varepsilon}}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-x')^2}{\mathrm{i}\varepsilon}} = \delta(x - x') \tag{35}$$

(vgl. Gl. (5.1–11)).

Die Kenntnis der Funktion U erlaubt, mittels Gl. (30) die zeitliche Ausbreitung eines beliebigen kräftefreien Wellenpaketes zu berechnen.

Setzen wir speziell zur Zeit $t = 0$ ein δ-artig konzentriertes Paket an $\psi(x', 0) \sim \delta(x')$, so liefert Gl. (30) einfach $\psi(x, t) \sim U(x, 0, t)$. Während also für $t = 0$ die Materiewelle streng lokalisiert ist, ist für $t > 0$ die Dichte $\varrho \sim |U|^2$ räumlich konstant: *Die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung bewirkt — auch ohne äußere Kräfte! —, daß eine Lokalisierung des Materiefeldes nicht aufrechterhalten bleibt.*

Eine realistischere Beschreibung dieses Sachverhaltes erhält man zum Beispiel, wenn man statt der δ-artigen Anfangsfeldverteilung eine GAUSS-Verteilung wählt

$$\psi(x, 0) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2a^2}} . \tag{36}$$

Die Materiedichte

$$\varrho(x, 0) = C\,|A|^2\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

---

[1]) Genauer gesprochen: $\sqrt{\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}$.

[2]) Man beachte, daß im Exponenten die klassisch-mechanische Wirkungsfunktion (Aufg. 4) eines kräftefreien Teilchens steht (vgl. dazu die Herleitung der SCHRÖDINGER-Gleichung in 1.3 § 3!).

ist dann im wesentlichen in der Umgebung $\Delta x = a$ des Nullpunktes konzentriert; für die Stromdichte dieses Wellenpaketes erhält man

$$i(x, 0) = \varrho \frac{\hbar}{m} k_0 .$$

Zu einem späteren Zeitpunkt $t > 0$ ist die Materieverteilung nach Gl. (30) und (36) gegeben durch

$$\psi(x, t) = A \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i t}}\, e^{i\frac{m}{2\hbar t}x^2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{x'^2\left[\frac{im}{2\hbar t} - \frac{1}{2a^2}\right] + ix'\left[k_0 - \frac{mx}{\hbar t}\right]} dx' .$$

Führt man jetzt die quadratische Ergänzung in x' durch, so erhält man in einer zur obigen Rechnung analogen Weise

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}}} \exp\left\{-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + i\frac{\hbar a^2k_0^2}{m}t}{2a^2\left(1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right\}. \tag{37}$$

Hieraus folgt für die Dichteverteilung

$$\varrho(x, t) = \frac{C\,|A|^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right\}. \tag{38}$$

Die größte Dichte herrscht also an der Stelle

$$x_m = \frac{\hbar k_0}{m} t, \tag{39}$$

d. h., die Welle bewegt sich — wie in 1.3 § 2 gefordert — mit der Gruppengeschwindigkeit $\hbar k_0/m$. Die Dichte an der Stelle x_m ist

$$\varrho(x_m, t) = \frac{C\,|A|^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} . \tag{40}$$

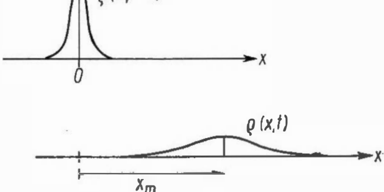


Fig. 16. Bewegung eines kräftefreien Materiefeldes

Die hierin zum Ausdruck kommende Abnahme der maximalen Dichte im Laufe der Zeit wird begleitet von einer *Verbreiterung* des Wellenpaketes (Fig. 16). Die Dichte ist zur Zeit t im wesentlichen in der Umgebung

$$\Delta x|_t = a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \tag{41}$$

von x_m konzentriert. Die Zeit τ, innerhalb der sich die anfängliche Breite a verdoppelt hat, ist damit

$$\tau = \sqrt{3}\,\frac{ma^2}{\hbar} . \tag{42}$$

Die Ursache dieses Zerfließens eines Wellenpaketes liegt darin, daß die Gruppengeschwindigkeit v_G der Materiewelle — im Gegensatz zu der des Lichtes im Vakuum — nach dem Dispersionsgesetz [Gl. (1.3-8)] selbst eine Funktion von k, nämlich $v_G = \frac{\hbar}{m} k$ ist. Bei einer Aufteilung des Paketes in Anteile mit verschiedenem k bewegen sich diese mit verschiedener Geschwindigkeit fort und bewirken damit ein Zerfließen des Paketes.

An dieser Stelle können wir bereits explizit sehen, daß die SCHRÖDINGERsche Wellenvorstellung der Materie ebensowenig wie die Punktmechanik eine angemessene Beschreibung des Mikrokosmos liefert. Versucht man nämlich, dem punktförmigen Charakter eines Elektrons dadurch im Wellenbild Rechnung zu tragen, daß man sagt, es handelt sich um ein auf einen endlichen Raumbereich lokalisiertes Feld, so ergibt die Beziehung (42), wenn man für m die Elektronenmasse und für a eine atomare Größenordnung ($\lesssim 10^{-8}$ cm) einsetzt, daß sich bereits nach einer Zeit

$$\tau \lesssim 10^{-16}\,\mathrm{s} \tag{43}$$

die Ausdehnung des Wellenpaketes verdoppelt hat. Die Lokalisierung des Elektrons läßt sich also im Laufe der Zeit nicht aufrechterhalten. *Dieses rasche Zerfließen des Materiefeldes ist eine der Ursachen dafür, daß auch der reine Feldstandpunkt keine ausreichende Beschreibung für das Verhalten der Elementarteilchen darstellt.* In der Quantentheorie werden wir zwar auch mit diesem Zerfließen konfrontiert werden [Gl. (3.5-50)], aber es handelt sich dort um ein Auseinanderlaufen der Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Ort des Teilchens und *nicht* um ein Zerfließen des Teilchens selbst!

§ 4. Das allgemeine Verhalten eindimensionaler, stationärer Lösungen

Den aus der Theorie der Differentialgleichungen bekannten Sachverhalt, wonach die Grenzbedingungen nur ganz bestimmte Lösungen zulassen, wollen wir am Beispiel der eindimensionalen, zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u_E}{\mathrm{d}x^2} = [V(x) - E]\, u_E(x) \tag{44}$$

anschaulich klarmachen und dabei gleichzeitig einen Vergleich mit dem entsprechenden klassisch-mechanischen Verhalten eines Teilchens im Potential $V(x)$ ziehen.

Da bereits einfache Potentialfunktionen $V(x)$ auf Differentialgleichungen führen, die nicht mehr durch elementare Funktionen $u_E(x)$ gelöst werden können, ist es zweckmäßig, nur das qualitative Verhalten zu untersuchen.

a) Das Materiefeld unter dem Einfluß einer Potentialmulde

Zunächst legen wir ein *muldenförmiges Potential* $V(x)$, das einer anziehenden Kraft entspricht, zugrunde. Zur Diskussion von Gl. (44) sind die aus der Fig. 17 ersichtlichen 3 Fälle zu unterscheiden.

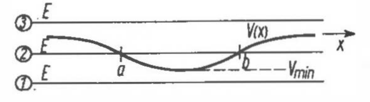


Fig. 17. Eine Potentialmulde

① Der Fall $E < V_{min}$ ist nach der klassischen Mechanik unmöglich, weil die kinetische Energie $T = E - V$ stets negativ wäre, was einer imaginären Teilchengeschwindigkeit entspräche.

Nach der SCHRÖDINGER-Gleichung (44) haben in diesem Fall u_E und u_E'' für alle x dasselbe Vorzeichen, d. h., die Funktion ist *stets* konvex zur x-Achse. Diese Funktionen divergieren daher für $x \to +\infty$ oder $-\infty$. Wegen der damit verbundenen Nichtexistenz von $\int |u_E|^2 \, dx$ sind alle diese Lösungen u_E auszuschließen.[1]) Der Fall ① ist also sowohl nach der Korpuskelmechanik als auch nach der Wellenmechanik *unmöglich*. Dies begründet z. B. auch, daß im kräftefreien Fall die Energie positiv sein muß (S. 71).

② In diesem Fall ist nach der klassischen Mechanik eine Teilchenbewegung im Intervall $a \leqq x \leqq b$ möglich. Die kinetische Energie $T = E - V$ ist dort positiv. Die Punkte a und b sind die *klassischen Umkehrpunkte*, in denen die kinetische Energie und damit die Teilchengeschwindigkeit Null ist. Außerhalb dieses Intervalls, also für $x < a$ und $x > b$, ist $T < 0$, eine klassische Bewegung also unmöglich.

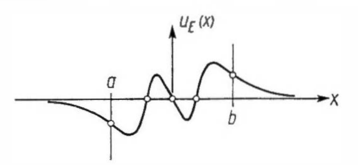


Fig. 18. Gebundene Materiewelle in einer Potentialmulde

Für das wellenmechanische Verhalten folgt aus Gl. (44), daß im Innern des Intervalls u und u'' entgegengesetzte Vorzeichen haben, d. h., $u(x)$ ist konkav zur x-Achse. Die dadurch möglichen Nullstellen von u bedingen ein im allgemeinen *oszillatorisches Verhalten* der Funktion $u(x)$, wie es etwa in Fig. 18 wiedergegeben ist. In den klassischen Umkehrpunkten a und b ist $u'' = 0$, d. h., die Funktion $u(x)$ hat dort Wendepunkte[2]). Außerhalb des Intervalls $[a, b]$ haben u und u'' wieder gleiches Vorzeichen, u ist dort konvex zur x-Achse. Beim Überschreiten der klassischen Umkehrpunkte geht das konkave in das konvexe Verhalten

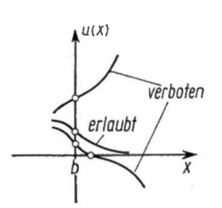


Fig. 19. Aussonderung von Eigenfunktionen durch das Verschwinden im Unendlichen

[1]) Man kann mit ihnen auch keine normierbaren Wellenpakete aufbauen.

[2]) Daneben sind auch noch alle Nullstellen von u Wendepunkte.

über. Wie aus Fig. 19 ersichtlich ist, erhält man damit je nach der Art, in der sich $u(x)$ von innen dem Umkehrpunkt b nähert, für $x \to \infty$ ein divergierendes oder konvergierendes u. Da aber nur konvergente Funktionen als physikalisch realisierbare Lösungen erlaubt sind, bedeutet dies, daß eine Reihe von Funktionen ausgesondert werden. Durch das Zusammenspiel der Grenzbedingungen für $x \to \pm\infty$ werden damit nur für ganz bestimmte Werte von E Lösungen $u_E(x)$ möglich, *die Eigenfunktionen zum Eigenwert E. Die Aussonderung dieser erlaubten Funktionen erfolgt also dadurch, daß die Funktionen in den Gebieten, in welche ein Teilchen nach der klassischen Mechanik überhaupt nicht gelangen kann, abklingen müssen. Solche „gebundene" Zustände von Materiewellen haben somit* — wenn auch abklingend — *eine endliche Dichte außerhalb des Bereichs der klassischen Teilchenbewegung.* In großer Entfernung, in der das Potential nahezu konstant ist, hat Gl. (44) die exponentiell abklingende Lösung

$$u \approx C e^{\mp\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_\infty - E)}\,x} \qquad (x \to \pm\infty). \tag{45}$$

Die gebundenen, stationären Lösungen sind *normierbar*, also physikalisch möglich.

③ Für solche Energien ist nach der klassischen Mechanik eine Bewegung längs der gesamten x-Achse möglich, das Teilchen ist nicht gebunden. In der wellenmechanischen Beschreibung ist nach der SCHRÖDINGER-Gleichung (44) $u(x)$ stets konkav zur x-Achse, d. h., es liegt längs der ganzen x-Achse ein *oszillatorisches* Verhalten von u vor. Die möglichen Energiewerte unterliegen keiner einschränkenden Bedingung: *Für nichtgebundene Zustände ist E kontinuierlich veränderlich.* Da eine Differentialgleichung 2. Ordnung (im Eindimensionalen) zwei linear unabhängige Lösungen $u_{1E}(x)$ und $u_{2E}(x)$ besitzt, ist die stationäre Lösung eine Linearkombination

$$u_E(x) = C_1 u_{1E}(x) + C_2 u_{2E}(x) \tag{46}$$

mit willkürlichen, komplexen Koeffizienten C_1 und C_2. Diese wählt man entsprechend der physikalischen Fragestellung, z. B. dadurch, daß eine von links einfallende Welle vorhanden sein soll, die durch die Wirkung des Potentials einerseits eine nach rechts durchgehende und andererseits eine nach links reflektierte Welle bedingt,

$$\begin{aligned} u_E(x \to -\infty) &= A_e e^{ikx} + A_r e^{-ikx}, \\ u_E(x \to +\infty) &= A_d e^{ikx} \end{aligned} \tag{47}$$

(„*Ausstrahlungsbedingung*" im Eindimensionalen). Während man also die Amplitude A_e willkürlich vorgibt, berechnen sich die Amplituden A_r und A_d aus Gl. (46), d. h. nach Maßgabe der SCHRÖDINGER-Gleichung. Ein solcher durch einen Materiestrom beschriebener Streuvorgang ist nicht durch eine reelle, sondern durch eine *komplexe* Partikularlösung (46) erfaßbar, weil der Strom nach Gl. (1.4–5) bei einer reellen Lösung verschwindet.

Eine ungefähre Abschätzung der Abstände der Nullstellen von $u_E(x)$ erhält man für den Fall, daß das Potential nur langsam veränderlich ist. Man kann dann entsprechend den Überlegungen in 1.3 § 3 für $u_E(x)$ eine nahezu ebene Welle ansetzen, die nach Gl. (1.3–31) die Wellenlänge

$$\lambda(x) \approx \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \tag{48}$$

besitzt. Die Abstände benachbarter Nullstellen sind also um so kleiner, je größer der Teilchenimpuls ist.

Die nichtgebundenen Zuständen entsprechenden stationären Lösungen (46) verschwinden wegen ihres oszillatorischen Verhaltens im Unendlichen nicht. Sie sind daher *nicht quadratintegrabel* und somit in Strenge ebensowenig physikalisch realisierbar wie die ebenen Wellen (16). Man kann jedoch die stationären Lösungen dazu benutzen, um aus ihnen nach Gl. (10) durch Linearkombination eine *nichtstationäre, quadratintegrable Lösung* $\psi(\mathfrak{r}, t)$ der zeitabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung zu konstruieren. Damit ist es möglich, eine Elektronenwolke zu beschreiben, die zur Zeit $t \to -\infty$ von links ($x \to -\infty$) als kräftefreies Wellenpaket einfällt, am Potential teilweise reflektiert wird und zum Teil hindurchgeht, so daß für $t \to +\infty$ links ($x \to -\infty$) und rechts ($x \to +\infty$) je ein auslaufendes, kräftefreies Wellenpaket resultiert (*Asymptotenbedingung* eindimensionaler Potentialstreuung) [vgl. auch Kap. 4.7].

b) Das Materiefeld unter dem Einfluß eines Potentialberges

Die Wirkung eines *Potentialberges* (Fig. 20), der einer abstoßenden Kraft entspricht, läßt sich in analoger Weise diskutieren. Gebundene Zustände gibt es jetzt nicht. Für den Fall ① ist wiederum weder eine punktmechanische noch eine wellenmechanische Lösung sinnvoll. Im Gebiet ③ ist wegen der abstoßenden Wirkung des Potentialberges der Abstand der Nullstellen von $u(x)$ in der Nähe des Berges am größten. Für Energien ② herrscht außerhalb der klassischen Umkehrpunkte a und b eine oszillatorische Wellenfunktion, während im Innern eine abklingende, zur x-Achse konvexe Lösung vorliegt. Wähltman wieder die der Streuung einer von links einfallenden Materiewelle entsprechende Ausstrahlungsbedingung (47), so ergibt sich wegen des auch im Intervall $[a, b]$ vorhandenen Materiefeldes eine nach $x \to \infty$ durchlaufende Welle endlicher Intensität. Dieser *Tunneleffekt* ist typisch für die Wellenmechanik, da nach der NEWTONschen Mechanik ein Teilchen mit der Energie ② die Stelle a nicht überschreiten kann.

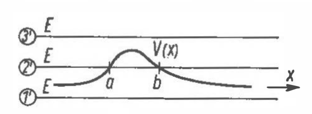


Fig. 20. Ein Potentialberg

Auf dem Tunneleffekt beruht die Erklärung des *α-Zerfalls:* Zum Beispiel geht das Element ${}_{92}U^{238}$ unter Aussendung eines α-Teilchens in das Element ${}_{90}Th^{234}$ über. Das Potential setzt sich (Fig. 21) aus einem Potentialtopf, herrührend von den Kernkräften, und dem abstoßenden COULOMB-Potential C zusammen. Wäre

das nach außen abfallende COULOMB-Potential nicht vorhanden, so gäbe es diskrete Energiezustände, die α-Materie wäre im Innern des Topfes gebunden (stationärer Zustand). Durch die Anwesenheit des COULOMB-Potentials hingegen werden alle Energiezustände $E > 0$ kontinuierlich (und zwar außerhalb und innerhalb des Topfes, da ja die Energie nicht ortsabhängig ist!). Ein Wellenpaket (α-Teilchen), das sich zu einer bestimmten Zeit im Innern des Topfes befindet, ist daher instationär und wandert nach Maßgabe der zeitabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung heraus.

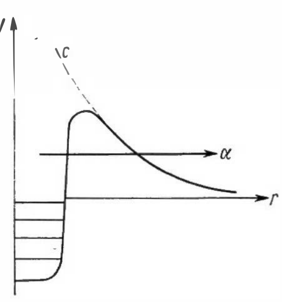


Fig. 21. Zum α-Zerfall

Der Tunneleffekt ist nicht nur in der Kern-, sondern auch in der Hüllenphysik von größter Wichtigkeit, so z. B. für den Elektronenaustritt aus Metalloberflächen.

Auch beim Licht ist ein „Tunneleffekt" möglich, der wesentlich auf der Wellennatur der elektromagnetischen Strahlung beruht. Nähert man nämlich einer totalreflektierenden Platte vom dünneren Medium her eine zweite Platte auf einen Abstand von etwa einer Wellenlänge, so tritt vermöge der bei der Totalreflexion im dünneren Medium vorhandenen, exponentiell abklingenden Welle auch in der zweiten Platte eine Welle auf: Die Totalreflexion wird überwunden, ohne daß sich die Platten materiell berühren.

Aufg. 18: Wie lautet die Eigenfunktion und der Energieeigenwert einer in dem Potential $V(x) = -\hat{V} \cdot \delta(x)$ ($\hat{V}$ positiv) gebundenen Materiewelle?

Aufg. 19: Man bestimme für $E < 0$ die Eigenwerte einer Materiewelle, die sich im Potential $V(x) = -\hat{V} \cdot [\delta(x) + \delta(x - a)]$ befindet (embryonales H_2^+-Ion). Man diskutiere das Ergebnis als Funktion von a.

Aufg. 20: Man berechne die Durchlässigkeit und das Reflexionsvermögen am Potential $V(x) = \hat{V} \cdot \delta(x)$.

§ 5. Beispiel: Materiewelle in einem undurchdringlichen Kasten

Es sollen die Eigenwerte und Eigenfunktionen einer Materiewelle bestimmt werden, die sich in einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden befindet (Fig. 22). Es handelt sich hier um die Idealisierung eines realen Problems mit sehr hohen Potentialwänden, z. B. ein Atom eines Gases in einem Gefäß. Der Bezugspunkt der Energie werde so gewählt, daß im Innern des Topfes $V = 0$ ist. Die möglichen Energiewerte sind dann positiv.

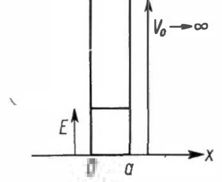


Fig. 22. Rechteckiger Potentialtopf

Nach Gl. (45) verschwindet die Eindringtiefe der Materie-

welle in die Wände mit $V_0 \to \infty$,

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \to 0, \tag{49}$$

d. h., für $x < 0$ und $x > a$ ist im Limes *kein* Materiefeld vorhanden. Das auf das Innere des Topfes beschränkte Feld ist also so zu wählen, daß es die Grenzbedingung

$$u_E(0) = u_E(a) = 0 \tag{50}$$

erfüllt.

Die Lösung der Differentialgleichung im Innern schreiben wir in der Form

$$u_E(x) = A \sin(kx + \delta) \qquad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right). \tag{51}$$

Aus den Grenzbedingungen (50), die gewährleisten, daß der Strom in den Randpunkten [Gl. (1.4–12)] verschwindet, folgt

$$\delta = 0 \quad \text{und} \quad k = \frac{n\pi}{a} \qquad (n = 1, 2, \ldots^{1)}). \tag{52}$$

Die möglichen Energiewerte sind also

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \tag{53}$$

und die zugehörigen Eigenfunktionen lauten

$$u_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}. \tag{54}$$

Die Amplitude ergibt sich bei der Normierung

$$\int_0^a |u_n|^2 \, dx = N$$

zu

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{a} N}. \tag{55}$$

Obwohl die Eigenwerte E_n quadratisch mit n anwachsen, wird der relative Abstand zweier benachbarter Eigenwerte

$$\frac{E_n - E_{n-1}}{E_n} = \frac{2n - 1}{n^2} \approx \frac{2}{n} \tag{56}$$

für große n immer kleiner. Die mittlere Dichte, d. h. der Mittelwert der für große n über eine Wellenlänge oft oszillierenden Ortsfunktion $|u_n|^2$, ist konstant.

Die vorstehende Rechnung läßt sich leicht auf eine Materiewelle in einem *undurchlässigen Kasten* mit den Seiten a, b und c erweitern. Wählt man für die Differentialgleichung

$$\Delta u + k^2 u = 0$$

als Partikularlösungen die Produktfunktionen

$$u(x, y, z) = A \sin(k_x x + \delta_x) \sin(k_y y + \delta_y) \sin(k_z z + \delta_z) \tag{57}$$

mit

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{58}$$

---

[1]) $n = 0$ tritt nicht auf, weil sonst $u \equiv 0$ wäre.

so liefert das Verschwinden von u in den sechs Ebenen $x = 0$, $y = 0$, $z = 0$, $x = a$, $y = b$, $z = c$ die Gleichungen

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0 \tag{59}$$

und

$$\left.\begin{array}{l} k_x = \dfrac{n_x \pi}{a}, \quad k_y = \dfrac{n_y \pi}{b}, \quad k_z = \dfrac{n_z \pi}{c} \\ (n_x, n_y, n_z > 0, \text{ ganz}). \end{array}\right\} \tag{60}$$

Zu den möglichen Energieeigenwerten

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{c}\right)^2\right] \tag{61}$$

gehören die Eigenfunktionen

$$u_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}. \tag{62}$$

Ist der Kasten insbesondere ein Würfel ($a = b = c$), so gehören zu einem Energieeigenwert

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2} n^2 \tag{63}$$

mit

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \tag{64}$$

i. allg. mehrere Eigenfunktionen

$$u_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{a} \sin \frac{n_z \pi z}{a} \tag{65}$$

(Fig. 23).

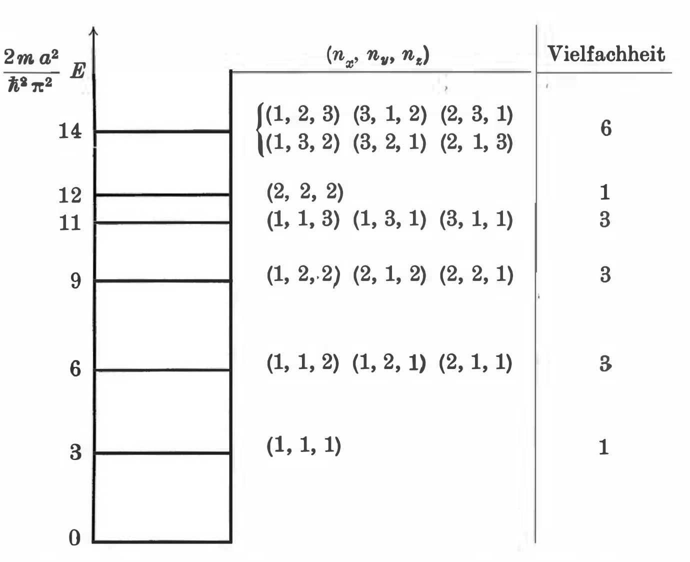


Fig. 23. Die tiefsten Energieeigenwerte und ihre Vielfachheit in einem würfelförmigen Kasten

Für eine große Kastenlänge a sind die Energieeigenwerte E_n eng benachbart. Wir fragen nach der *Dichte der Energiezustände*, d. h. nach der Anzahl dg von Energieeigenfunktionen, die in einem Intervall $E \cdots E + \mathrm{d}E$ liegen. Dazu betrachten wir einen dreidimensionalen Raum mit den Koordinaten n_x, n_y, n_z. Jede Eigenfunktion (65) ist wegen der Ganzzahligkeit der n_x, n_y, n_z durch einen Gitterpunkt im 1. Oktanden charakterisiert (Fig. 24). Die Energiezustände haben also in diesem n-Raum die Dichte eins. Die Anzahl dg von Energieeigenfunktionen in einer Kugelschale $n \cdots n + \mathrm{d}n$ ist daher gleich dem Volumen dieser Schale,

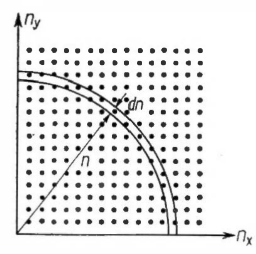


Fig. 24. Zur Abzählung der Dichte der Energiezustände in einem Kasten

$$\mathrm{d}g = \frac{1}{8}\, 4\pi n^2\, \mathrm{d}n \tag{66}$$

(der Faktor $\frac{1}{8}$ bringt zum Ausdruck, daß nur der erste Quadrant zu betrachten ist). Andererseits ist aber nach Gl. (63)

$$\mathrm{d}E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m a^2}\, n\, \mathrm{d}n, \tag{67}$$

so daß man für die Dichte der Energiezustände in einem Kasten des Volumens V erhält

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}E} = \frac{V}{4\pi^2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}^{\,3}\sqrt{E}}\,. \tag{68}$$

§ 6. Die Eigenfunktionen der dreidimensionalen, zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung mit Potential

Für ein Materiefeld unter der Wirkung eines beliebigen Potentials $V(\mathfrak{r})$ erlauben die Randbedingungen — ähnlich wie im Eindimensionalen (§ 4) — im allgemeinen nur ganz bestimmte Energien E. Die zugehörigen Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$, die der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathfrak{r})\right] u_a(\mathfrak{r}) = E_a u_a(\mathfrak{r}) \tag{69}$$

genügen, charakterisieren wir durch die Größe a, welche repräsentativ für einen ganzen Satz von Separationskonstanten steht.

Im Beispiel der kräftefreien Welle (§ 2) bedeutet also a die Komponenten des Ausbreitungsvektors k_x, k_y, k_z, wenn man in kartesischen Koordinaten separiert und m, l, k bei Separation in Kugelkoordinaten. Für eine Welle in einem Kasten (§ 5) steht a für die ganzen Zahlen n_x, n_y, n_z.

Im Fall gebundener Zustände ist E diskret und a der Index, der die verschiedenen Eigenwerte numeriert (einschließlich einer evtl. vorhandenen Entartung). Für ungebundene Zustände hingegen ist E_a kontinuierlich veränderlich.

Am Beispiel der ebenen Wellen (§ 2) lernten wir bereits die Orthogonalität der Eigenfunktionen kennen. Diese gilt ganz allgemein für die erlaubten Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung (69): *Sie sind orthogonal und können normiert werden,* d. h., es gilt

$$\boxed{\int u_{a'}^*(\mathfrak{r})\, u_a(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x = \delta(a', a)}\,; \tag{70}$$

dabei bedeutet $\delta(a', a)$ die Zusammenfassung von KRONECKER-Symbol $\delta_{a'a}$ (für diskrete a) und DIRAC-Funktion $\delta(a' - a)$ (für kontinuierlich veränderliche a) (vgl. 5.1 § 1).

Beweis von Gl. (70): Im Fall eines diskreten Energiespektrums läßt sich die Orthogonalität, d. h., daß für $a' \neq a$ das Integral (70) verschwindet, leicht mittels der SCHRÖDINGER-Gleichung (69) beweisen. Dazu multiplizieren wir Gl. (69) mit einer Eigenfunktion $u_{a'}^*(\mathfrak{r})$, die zu einem Eigenwert $E_{a'} \neq E_a$ gehört[1]) und integrieren über den ganzen Raum,

$$\int u_{a'}^*(\mathfrak{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathfrak{r})\right] u_a(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x = E_a \int u_{a'}^*(\mathfrak{r})\, u_a(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x. \tag{71}$$

Nun vertauschen wir a mit a', gehen zur konjugiert-komplexen Gleichung über und subtrahieren die entstehende Gleichung von Gl. (71). Die Anwendung des GREENschen Satzes [vgl. Fußnote [2]) auf S. 66] auf die linke Seite liefert

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \oint_\infty [u_{a'}^*(\mathfrak{r}) \operatorname{grad} u_a(\mathfrak{r}) - u_a(\mathfrak{r}) \operatorname{grad} u_{a'}^*(\mathfrak{r})]\, \mathrm{d}\mathfrak{f} \\ = (E_a - E_{a'}) \int u_{a'}^*(\mathfrak{r})\, u_a(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x. \end{aligned} \tag{72}$$

Für gebundene Zustände (diskrete E_a) verschwindet $u_a(\mathfrak{r})$ im Unendlichen, daß das Oberflächenintegral Null wird. Für $E_a \neq E_{a'}$ ist daher das in Gl. (72) rechts stehende Volumenintegral Null, was zu beweisen war. Die Normierung für $a = a'$ ist willkürlich. Es ist aber zweckmäßig, die in Gl. (70) getroffene Normierung auf 1 zu wählen.

Im Fall eines *kontinuierlichen* Energiespektrums verschwinden die Eigenfunktionen im Unendlichen nicht. Für die Behandlung von Streuprozessen ist es notwendig, daß die stationären Lösungen der (dreidimensionalen) *Ausstrahlungsbedingung*

$$\lim_{r\to\infty} u_a(\mathfrak{r}) = \mathrm{e}^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}} + f(\vartheta, \varphi)\,\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{73}$$

genügen $\left(k = \sqrt{\mathfrak{k}^2}\right)$. Man erfaßt damit eine einlaufende, ebene Welle, die am Potential eine Streuung erfährt, so daß im Unendlichen auch eine auslaufende Kugel-

[1]) Wie man im Fall eines *entarteten* Energiespektrums — wenn also mehrere Eigenfunktionen zu einem Eigenwert E gehören — zu orthonormierten Eigenfunktionen gelangt, ist in 2.3 § 5 dargelegt.

welle (Streuwelle) vorhanden ist. Um nun aus Gl. (72) die Orthonormierung der $u_a(\mathfrak{r})$ auf δ-Funktion zu beweisen, ist es nötig, Wellenpakete [sog. „Eigendifferentiale“ von (69)] über ein kleines Intervall Δa zu betrachten [vgl. Gl. (2.1–24)]. Auf die Durchführung dieses Beweises wollen wir verzichten.[1]) Es möge jedoch auch hier noch einmal darauf hingewiesen werden, daß die Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ für kontinuierliche Energie in Strenge gar keine physikalisch realisierbaren Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung darstellen, weil das Integral über $|u_a(\mathfrak{r})|^2$ divergiert. Man kann sie jedoch wieder dazu verwenden, um aus ihnen durch Linearkombinationen (10a) normierbare, nichtstationäre Lösungen $\psi(\mathfrak{r}, t)$ aufzubauen, die dann die Streuung eines Wellenpaketes am Potential beschreiben (vgl. Kap. 4.7).

Aufg. 21: Das Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, 0)$ sei zur Zeit $t = 0$ gegeben. Wie lautet in einem Potential $V(\mathfrak{r})$ das Feld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ zu einem späteren Zeitpunkt t, wenn die Eigenwerte E_a und die Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung bekannt sind?

§ 7. Entwicklung des Materiefeldes nach einem beliebigen, vollständigen, normierten Orthogonalsystem

a) Die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten

Es ist häufig zweckmäßig, das Materiefeld nicht nach den Lösungen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung (69) zu entwickeln, sondern nach einem beliebig vorgegebenen, vollständigen, normierten Orthogonalsystem von Funktionen $v_k(\mathfrak{r})$. Das heißt, daß diese Funktionen die Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} &\int v_{k'}^*(\mathfrak{r})\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x = \delta(k', k), \\ &\mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k v_k^*(\mathfrak{r}')\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k = \delta(\mathfrak{r}' - \mathfrak{r}) \end{aligned}\right\} \tag{74}$$

erfüllen müssen. Die Vollständigkeitsbedingung (74_2) gewährleistet, daß *jede* quadratintegrable Funktion $\psi(\mathfrak{r}, t)$ nach den $v_k(\mathfrak{r})$ entwickelbar ist (vgl. Kap. 2.1). Die Entwicklung nach solchen Funktionen — etwa eine FOURIER-Entwicklung — ist z. B. angebracht, wenn man die Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ nicht kennt.

Zur Beschreibung der Zeitabhängigkeit des Materiefeldes $\psi(\mathfrak{r}, t)$ ist es notwendig, daß die (komplexen) Entwicklungskoeffizienten c_k Zeitfunktionen werden,

$$\boxed{\psi(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k c_k(t)\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k} \,. \tag{75}$$

[1]) Für den Fall, daß E_a diskret und $E_{a'}$ kontinuierlich ist, genügt das Verschwinden von $u_a(\mathfrak{r})$ und grad $u_a(\mathfrak{r})$ im Unendlichen, um aus Gl. (72) die Orthogonalität von $u_a(\mathfrak{r})$ und $u_{a'}(\mathfrak{r})$ zu beweisen.

Wegen der Orthogonalität (74_1) der Funktionen $v_k(\mathfrak{r})$ läßt sich diese Gleichung nach den Entwicklungskoeffizienten $c_k(t)$ auflösen: Man multipliziere mit $v_{k'}^*(\mathfrak{r})$ und integriere unter Benutzung von Gl. (74_1) über den ganzen Raum,

$$\boxed{c_k(t) = \int v_k^*(\mathfrak{r})\, \psi(\mathfrak{r}, t)\, \mathrm{d}^3x} \,. \tag{76}$$

Die Entwicklung (75) und ihre Umkehrung (76) ist die Verallgemeinerung des FOURIERschen Theorems auf ein beliebiges, vollständiges, orthonormiertes Funktionensystem $v_k(\mathfrak{r})$.

Die Entwicklung nach den stationären Lösungen $u_a(\mathfrak{r})$ ist ein Spezialfall: Es wird

$$c_a(t) = c_a \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_a t} \,. \tag{77}$$

Eine andere (fast triviale) Entwicklung ist jene nach δ-Funktionen: Man ersetze $v_k(\mathfrak{r}) \to \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}')$ (mit $k \to \mathfrak{r}'$), so daß die Entwicklungskoeffizienten c_k mit der Feldfunktion $\psi(\mathfrak{r})$ identisch werden.

Setzt man die Entwicklung (75) in die zeitabhängige SCHRÖDINGERsche Feldgleichung ein, so erhält man

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k \frac{\mathrm{d}c_k(t)}{\mathrm{d}t}\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k c_k(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r})\right] v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k \,.$$

Multipliziert man wieder mit $v_{k'}^*(\mathfrak{r})$ und integriert über den Raum, so erhält man wegen der Orthogonalität der v_k (nach Vertauschung von k mit k') die Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}c_k}{\mathrm{d}t} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} \varepsilon_{kk'}\, c_{k'}(t)\, \mathrm{d}k'} \,. \tag{78}$$

Dabei sind die Koeffizienten $\varepsilon_{kk'}$ gegeben durch

$$\varepsilon_{kk'} = \int v_k^*(\mathfrak{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r})\right] v_{k'}(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x \,. \tag{79}$$

Das Differentialgleichungssystem (78) ist *äquivalent* zur SCHRÖDINGERschen Feldgleichung und bestimmt die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten $c_k(t)$.

Wählt man für die $v_k(\mathfrak{r})$ speziell die Lösungen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung, so folgt aus Gl. (79)

$$\varepsilon_{aa'} = E_a\, \delta(a, a') \,, \tag{79a}$$

und aus (78) wird

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}c_a(t)}{\mathrm{d}t} = E_a c_a(t) \,, \tag{78a}$$

woraus wieder das bekannte Ergebnis (77) folgt.

Entwickelt man andererseits nach $\delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}')$, so erhält man aus Gl. (79) $[\mathfrak{r} \to \bar{\mathfrak{r}}]$

$$\varepsilon_{\mathfrak{r}\mathfrak{r}'} = \int \delta(\bar{\mathfrak{r}} - \mathfrak{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\bar{\mathfrak{r}}} + V(\bar{\mathfrak{r}})\right] \delta(\bar{\mathfrak{r}} - \mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3\bar{x} \,,$$

d. h.

$$\varepsilon_{\mathfrak{r}\mathfrak{r}'} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right]\delta(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'). \tag{79b}$$

Gl. (78) geht dabei natürlich wieder in die Form (1) der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-schen Feldgleichung über.

b) Entwicklung der Observablen des Materiefeldes nach den Amplituden von Partialwellen

Setzt man die Entwicklung (75) des SCHRÖDINGER-Feldes nach irgendwelchen „Partialwellen“ $v_k(\mathfrak{r})$ in die in Kap. 1.4 gewonnenen Ausdrücke für die Observablen des Feldes ein, so erhält man diese in Abhängigkeit von den Amplituden $c_k(t)$ der Partialwellen.

Für die „*Intensität*“ des Feldes ergibt sich auf diese Weise

$$N = \int \psi^*\psi \, d^3x = \int_x \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk'} c_k^*(t)\, v_k^*(\mathfrak{r})\, c_{k'}(t)\, v_{k'}(\mathfrak{r})\, dk\, dk'\, d^3x$$

und bei Berücksichtigung der Orthonormierung der v_k

$$\boxed{N = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{k} c_k^*(t)\, c_k(t)\, dk}\,. \tag{80}$$

Die gesamte Intensität setzt sich also additiv aus den Intensitäten

$$N_k(t) = c_k^*(t)\, c_k(t) \tag{81}$$

der einzelnen Partialwellen zusammen. Diese Partialintensitäten sind im allgemeinen *zeitabhängig* nach Maßgabe von Gl. (78). Entwickelt man jedoch speziell nach den Lösungen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung, so folgt aus Gl. (77), daß dann die Partialintensitäten zeitlich konstant sind,

$$N_a = c_a^* c_a. \tag{82}$$

Eine entsprechende Rechnung für die gesamte *Feldenergie* W führt auf

$$\boxed{W = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk'} \varepsilon_{kk'} c_k^*(t)\, c_{k'}(t)\, dk\, dk'}\,. \tag{83}$$

Im Fall stationärer Partialwellen ergibt Gl. (79a) die Vereinfachung

$$\boxed{W = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{a} E_a c_a^* c_a\, da = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{a} E_a N_a\, da}\,, \tag{84}$$

d. h., die Gesamtenergie ist die Summe über die Energieeigenwerte, multipliziert mit den Intensitäten der zugehörigen stationären Partialwellen.

Für den *Gesamtimpuls* des Materiefeldes folgt

$$\mathfrak{P} = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk'} \mathfrak{p}_{kk'} c_k^*(t)\, c_{k'}(t)\, dk\, dk', \tag{85}$$

wenn man setzt

$$\mathfrak{p}_{kk'} = \int v_k^*(\mathfrak{r}) \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \operatorname{grad} v_{k'}(\mathfrak{r}) \, \mathrm{d}^3x. \tag{86}$$

Entwickelt man insbesondere nach ebenen Wellen $v_{\mathfrak{k}} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}$, so wird $\mathfrak{p}_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'} = \hbar \mathfrak{k}' \delta(\mathfrak{k} - \mathfrak{k}')$, und der Gesamtimpuls vereinfacht sich zu

$$\mathfrak{P} = \int \hbar \mathfrak{k} N(\mathfrak{k}, t) \, \mathrm{d}^3k. \tag{87}$$

Es ist dabei zu beachten, daß die Partialintensitäten $N(\mathfrak{k}, t)$ der ebenen Wellen bei Anwesenheit eines Potentials nicht zeitlich konstant sind, weil die ebenen Wellen dann keine Lösungen der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung sind. Nur im kräftefreien Fall ist $N(\mathfrak{k})$ zeitunabhängig.

Die Entwicklung der übrigen Observablen des Feldes, wie Schwerpunkt, Drehimpuls usw., nach den Amplituden der Partialwellen liegt auf der Hand. Wir wollen daher auf ihre Anschreibung verzichten.

Aufg. 22: Man entwickle den Schwerpunkt $\mathfrak{R}$ und den Drehimpuls $\mathfrak{L}$ des SCHRÖDINGER-Feldes nach ebenen Wellen.

Sechstes Kapitel

Das Versagen des Wellenbildes der Materie

§ 1. Die elektromagnetische Selbstwechselwirkung eines geladenen Materiefeldes

Die Bewegung eines geladenen Materiefeldes wird durch die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung (1.3–38) beschrieben. Die darin auftretenden elektromagnetischen Potentiale $\mathfrak{A}$ und φ können einerseits durch äußere elektromagnetische Felder verursacht werden. Andererseits sind aber auch die Raumladung ϱ und der elektrische Strom $\mathfrak{i}$ des Materiefeldes selbst wiederum Quelle eines elektromagnetischen Feldes, das auf die Verteilung $\psi(\mathfrak{r}, t)$ des Materiefeldes rückwirkt. Zur Erfassung dieser *elektromagnetischen Selbstwechselwirkung* des SCHRÖDINGER-Feldes ist es nötig, die Ausdrücke (1.4–11) für Ladung und Strom des Materiefeldes in die MAXWELLschen Gleichungen einzusetzen. Insgesamt erhält man damit zusammen mit Gl. (1.3–38) *ein Differentialgleichungssystem, das das* SCHRÖDINGER-*Feld mit dem* MAXWELL-*Feld koppelt*[1]).

Wir wollen hier jedoch nur *einen* Effekt des Eigenfeldes, nämlich die COULOMB*sche Wechselwirkung* der Raumladungsverteilung eines Materiefeldes behandeln.

[1]) Legt man an Stelle der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung zur relativistischen Beschreibung des Elektronenfeldes die sog. DIRAC-Gleichung zugrunde, so hat man den feldtheoretischen Ausgangspunkt der *Quantenelektrodynamik* vor sich.

Das durch die Stromverteilung erzeugte elektromagnetische Strahlungsfeld bleibt unberücksichtigt. In der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung kommt also der Einfluß des elektrostatischen Potentials φ, das sich nach der POISSONschen Gleichung berechnet, hinzu,

$$\left.\begin{aligned} \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\mathfrak{r})\,\psi + q\varphi\psi = 0 \\ \Delta\varphi + 4\pi q \psi^* \psi = 0 \end{aligned}\right\} . \qquad (1)$$

Dabei ist $V(\mathfrak{r})$ die potentielle Energie äußerer Kräfte, z. B. im Atom die COULOMB-Wechselwirkung mit dem Kern, während $\varphi(\mathfrak{r})$ das elektrische Potential ist, das durch das Materiefeld am Ort $\mathfrak{r}$ hervorgerufen wird. Wie aus der Elektrostatik bekannt ist, ergibt die Integration der zweiten Gleichung für φ im Aufpunkt $\mathfrak{r}$

$$\varphi(\mathfrak{r}, t) = q \int\limits_{\mathfrak{r}'} \frac{\psi^*(\mathfrak{r}', t)\, \psi(\mathfrak{r}', t)}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, \mathrm{d}^3x' . \qquad (2)$$

Durch Einsetzen in die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung erhält man

$$\left\{\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r}) + q^2 \int\limits_{\mathfrak{r}'} \frac{\psi^*(\mathfrak{r}', t)\, \psi(\mathfrak{r}', t)}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, \mathrm{d}^3x'\right\} \psi(\mathfrak{r}, t) = 0 , \qquad (3)$$

eine komplizierte, nichtlineare Integrodifferentialgleichung für das Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, t)$. Der Einfluß der abstoßenden COULOMB-Wechselwirkung ist an Stellen großer Intensität besonders groß und äußert sich in einem Auseinanderdrängen des Materiefeldes.

Setzt man in (3) die Entwicklung (1.5–75) des Materiefeldes nach Funktionen $v_k(\mathfrak{r})$ ein, so erhält man in Erweiterung von Gl. (1.5–78) für die zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten $c_k(t)$ jetzt die Gleichung

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}c_k(t)}{\mathrm{d}t} = & \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} \varepsilon_{kk'} c_{k'}(t)\, \mathrm{d}k' + \\ & + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1,k_2,k_3} \varepsilon_{kk_1;k_2k_3} c^*_{k_1}(t)\, c_{k_2}(t)\, c_{k_3}(t)\, \mathrm{d}k_1\, \mathrm{d}k_2\, \mathrm{d}k_3 \end{aligned} . \qquad (4)$$

Dabei ist $\varepsilon_{kk'}$ wieder durch Gl. (1.5–79) gegeben. Die Größen

$$\varepsilon_{kk_1;k_2k_3} \equiv q^2 \int\limits_{\mathfrak{r},\mathfrak{r}'} \frac{v^*_k(\mathfrak{r})\, v^*_{k_1}(\mathfrak{r}')\, v_{k_2}(\mathfrak{r})\, v_{k_3}(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x' \qquad (5)$$

stellen den Einfluß der COULOMB*schen Selbstwechselwirkung* dar.

An dieser Stelle stoßen wir auf eine weitere Schwierigkeit des reinen Feldbildes: Bei einer feldtheoretischen Beschreibung eines Elektrons durch ein auf ein bestimmtes Raum-Zeit-Gebiet konzentriertes Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ sollte dieses

Feld nach Gl. (3) eine innere elektrostatische Abstoßung erfahren. Man müßte daher statt der einfachen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung (1.3–32) stets die kompliziertere Gleichung (3) verwenden. Die darin enthaltene elektrostatische Selbstwechselwirkung läßt sich aber z. B. in einem Wasserstoffatom experimentell *nicht* nachweisen! Die richtigen Energiewerte ergeben sich vielmehr, wenn man ad hoc die innere COULOMB-Wechselwirkung der Elektronenwolke nicht berücksichtigt. *Die historische SCHRÖDINGERsche Herleitung der Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms enthält also eine im Rahmen des klassischen Feldbildes unverständliche Voraussetzung.*

Sind jedoch *mehrere* Elektronen in der Ladungswolke „enthalten" (z. B. im He-Atom), so macht sich die COULOMBsche Selbstwechselwirkung experimentell bemerkbar, freilich auch nur in einer modifizierten (quantisierten) Weise. Erst im Grenzfall sehr großer Teilchenzahlen liefert die feldtheoretische Gleichung (3) Ergebnisse, die mit den Experimenten übereinstimmen.

§ 2. Feldgleichung und Teilchenzahl

Aus einer Reihe von Argumenten gegen den Versuch, die Teilcheneigenschaften im Wellenbild befriedigend unterzubringen, haben wir zwei wesentliche kennengelernt: Erstens das nach der Feldtheorie gegebene rasche Zerfließen der Wellenpakete, die die Lokalisierung eines Teilchens zum Ausdruck bringen sollten und zweitens die eben erwähnte elektrostatische Abstoßung innerhalb der Materiewolke *eines* Elektrons, die experimentell nicht nachweisbar ist.

Der Begriff des Teilchens ist dem Wellenbild ebenso fremd wie der Begriff der Wellenlänge dem Partikelbild. *Im Rahmen der Feldtheorie ist überhaupt nicht zu entscheiden, welche Anzahl von Teilchen durch die Feldgleichung erfaßt wird*, d. h., ob ein Teilchen in einer Ladungswolke verschmiert ist oder ob mehrere Teilchen in ihr enthalten sind.

Da die *Intensität* $N = \int \psi^* \psi \, d^3x$ — ein Maß für die Stärke des Feldes — durch die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung nicht festgelegt wird, liegt es nahe, diese Größe mit der *Anzahl der Teilchen* zu korrelieren. Diese Intensität muß also in ähnlicher Weise „gequantelt" sein wie die Energie des PLANCKschen Oszillators. Wegen der genannten Schwierigkeiten, die sich einer vollständigen Unterbringung aller Teilcheneigenschaften im Feldbild in den Weg stellen, läßt sich aber eine befriedigende Theorie nicht einfach dadurch erreichen, daß man die Teilchenzahl ad hoc im Feldbild einführt, indem man je nach der vorhandenen Teilchenzahl über den Wert von N verfügt. Es muß vielmehr eine solche Modifikation der Feldtheorie (die sog. „*Quantenfeldtheorie*") gegeben werden, in der auch z. B. das Zerfließen der Wellenpakete nicht mehr ein Auseinanderlaufen der Teilchen selbst bedeutet, so daß kein Widerspruch mit der Lokalisierung der Teilchen entsteht. Diese Quantentheorie ist u. a. in der Tat auch imstande, das im vorangehenden Paragraph erwähnte quantisierte Auftreten der COULOMB-

schen Wechselwirkungsenergie je nach der Anzahl der im Experiment beteiligten Elektronen zu erklären (Kap. 4.6). Für große Teilchenzahlen gehen die quantentheoretischen Aussagen in jene der klassischen Feldgleichung (3) über, weil dann die spezifischen Partikeleigenschaften vernachlässigbar sind. Entsprechendes gilt auch für die klassische Elektrodynamik: Die Aussagen der MAXWELL-Gleichung sind bei hoher Photonenzahl richtig.

Darüber hinaus ist das Studium der klassischen Feldgleichungen auch deshalb von Bedeutung, weil sie den Ausgangspunkt für die Aufstellung der Quantenfeldtheorie bilden.

Schließlich werden wir im Rahmen der Quantentheorie sehen (Kap. 3.5 u. 4.1), daß die im vorangehenden Kapitel gegebenen Lösungen der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung *ohne* Wechselwirkung als quantenmechanische Lösungen von (nichtrelativistischen) *Ein*teilchenproblemen interpretierbar sind — sofern man die klassische Feldfunktion $\psi(\mathfrak{r}, t)$ als „Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ für eine Ortsmessung" liest.

Siebentes Kapitel[1])

Der Lagrange- und Hamilton-Formalismus für Felder

Für den Übergang vom klassischen Feld zur Quantenfeldtheorie ist es zweckmäßig, die klassische Feldtheorie in eine solche Form zu bringen, die mit der LAGRANGE- und HAMILTON-Theorie der Punktmechanik (Kap. 1.2) möglichst übereinstimmt. Diese Formulierung der Feldtheorie ist keineswegs auf das SCHRÖDINGERsche Materiefeld beschränkt. Wir betrachten irgendein Feld, das durch Komponenten $\psi_i(\mathfrak{r}, t)$ beschrieben wird; im Fall des elektromagnetischen Feldes sind dies die Potentiale $\mathfrak{A}$ und φ, im Beispiel des SCHRÖDINGER-Feldes Real- und Imaginärteil von ψ. Der Index i kann aber auch die Komponenten verschiedener Feldtypen umfassen, die untereinander in Wechselwirkung stehen.

§ 1. Die Feldgleichungen als Lagrangesche Gleichungen

Ebenso wie in der Mechanik die Bewegungsgleichungen für $q_i(t)$ aus dem Wirkungsprinzip (1.2 § 1) hergeleitet werden, sollen nun die Feldgleichungen für $\psi_i(\mathfrak{r}, t)$ mit einem Variationsprinzip verknüpft werden. Dazu ist es nötig, für die verschiedenen Felder (SCHRÖDINGER, MAXWELL usw.) eine LAGRANGE-Funktion so zu wählen, daß die zugehörigen LAGRANGEschen Gleichungen mit den gewünschten Feldgleichungen übereinstimmen. Die Bedeutung dieses Vorgehens liegt also nicht in der Gewinnung einer bestimmten Feldgleichung (die gibt

[1]) Dieses Kapitel kann beim ersten Studium überschlagen werden. Es wird erst im Kap. 4.6 wesentlich benötigt.

man sich ja vor), als vielmehr darin, auch für Felder einen mathematischen Formalismus zu entwickeln, der weitgehend mit jenem der Mechanik übereinstimmt und der es auch z. B. — wie dort (1.2 § 3) — erlaubt, die Zusammenhänge zwischen Symmetrie und Erhaltungssätzen zu formulieren und daraus zu Definitionen von physikalischen Observablen der Felder zu gelangen (§ 4).

In der Mechanik besitzt man eine einzige unabhängige Variable (die Zeit t), und man hat daher ein eindimensionales Variationsproblem vorliegen. Bei den Feldern hingegen sind die unabhängigen Variablen die Raum- und Zeitkoordinaten $\mathfrak{r}$, t, so daß der wesentliche Unterschied gegenüber der Mechanik darin besteht, daß jetzt das Variationsproblem vierdimensional ist,

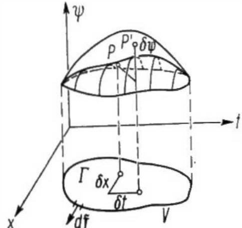


Fig. 25. Zum Variationsprinzip der Feldtheorie

Mechanik Feldtheorie

$$\delta \int_{P^0}^{P^1} L \, dt = 0, \qquad \boxed{\delta \int_\Gamma l \, d^3x \, dt = 0} \,. \tag{1}$$

Das Integral wird über einen vierdimensionalen Bereich Γ erstreckt. Zur Veranschaulichung ist in Fig. 25 für ein Problem mit einer Ortsvariablen die gesuchte Funktion $\psi(x, t)$ über dem Gebiet Γ der x, t-Ebene gezeichnet. Man beachte die Analogie zu Fig. 9.

Es ist zweckmäßig, an Stelle der Zeit t eine Variable der Dimension eines Ortes einzuführen. Damit der Kalkül auch gleich auf relativistische Felder zugeschnitten ist, benützt man dazu die Größe $x_4 = \mathrm{i}ct$[1] (c = Lichtgeschwindigkeit).

An Stelle der f Lagekoordinaten $q_i(t)$ in der Punktmechanik treten jetzt f Feldkomponenten $\psi_i(x_\mu)$ ($i = 1, \ldots, f$). Ist das Feld komplex (wie das SCHRÖDINGER-Feld), $\psi = \psi_1 + \mathrm{i}\psi_2$, so fungieren Real- und Imaginärteil ψ_1, ψ_2 als zwei Komponenten. Meist ist es statt dessen bequemer, ψ und ψ^* als unabhängige Feldkomponenten aufzufassen („kein Stern" und „Stern" sind dann als Indizes i zu lesen).

Die LAGRANGE-Funktion l („LAGRANGE-Dichte") eines Feldes ist eine Funktion der Feldgrößen ψ_i und ihrer räumlichen und zeitlichen Ableitungen, die wir abkürzend mit

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial x_\mu} = \partial_\mu \psi_i \qquad (\mu = 1, \ldots, 4; i = 1, \ldots, f) \tag{2}$$

bezeichnen. Außerdem wollen wir zulassen, daß die LAGRANGE-Funktion auch noch explizit von den x_μ abhängen kann, wodurch Fälle erfaßt werden, in denen

[1]) Solange man jedoch nicht verlangt, daß sich $x_\mu = (x_1, x_2, x_3, \mathrm{i}ct)$ wie ein 4-Vektor transformiert, bedeutet diese Bezeichnung allein natürlich noch keine relativistische Invarianz!

das betrachtete System „offen“, d. h. vorgegebenen raum-zeitlichen äußeren Einwirkungen unterworfen ist, also etwa fest vorgegebenen Feldern, die bei der Variation selbst nicht mit in die Betrachtung eingeschlossen werden. An die Stelle der LAGRANGE-Funktion der Punktmechanik

$$L = L(q_i, \dot{q}_i, t)$$

tritt somit bei Feldern die LAGRANGE-Funktion

$$\boxed{l = l(\psi_i, \partial_\mu \psi_i, x_\mu)}\,. \tag{3}$$

Die tatsächlich vorliegenden Feldfunktionen $\psi_i(x_\mu)$ sollen also durch die Forderung bestimmt werden, daß das vierdimensionale Wirkungsintegral (1) extremal wird. Die Behandlung dieses Variationsproblems erfolgt auf eine zum eindimensionalen Fall (1.2 § 1) ganz analoge Weise. Wir wollen daher die entsprechende Rechnung hier nicht noch einmal in voller Ausführlichkeit wiederholen.

In diesem Kapitel lassen wir der Übersicht halber die Summenzeichen weg und treffen die Konvention, daß in einem Produkt über zwei gleiche Indizes stets zu summieren ist, z. B.

$$a_\mu b_\mu = \sum_\mu a_\mu b_\mu .$$

In der Variation [analog Gl. (1.2–6)]

$$\delta(l\,\mathrm{d}^4x) = \delta l \cdot \mathrm{d}^4x + l\,\delta\mathrm{d}^4x \tag{4}$$

bedeutet der zweite Term die Variation des vierdimensionalen Volumelements $\mathrm{d}^4x = \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}t$. Weil $\mathrm{d}^4(x + \delta x)$ aus d^4x durch Multiplikation mit der Funktionaldeterminante entsteht, erhält man in erster Ordnung

$$\mathrm{d}^4(x + \delta x) = \det[\partial_\lambda(x_\mu + \delta x_\mu)]\,\mathrm{d}^4x \approx (1 + \partial_\mu \delta x_\mu)\,\mathrm{d}^4x,$$

d. h.

$$\delta\mathrm{d}^4x = \partial_\mu \delta x_\mu \cdot \mathrm{d}^4x\,. \tag{5}$$

Berücksichtigt man ferner, daß für die Variationen von $\partial_\mu \psi_i$

$$\delta\partial_\mu \psi_i = \partial_\mu \delta\psi_i - \partial_\nu \psi_i \cdot \partial_\mu \delta x_\nu \tag{6}$$

gilt [analog zu Gl. (1.2–4)], so erhalten wir aus Gl. (3)

$$\begin{aligned} \delta(l\,\mathrm{d}^4x) = \Big[&\frac{\partial l}{\partial \psi_i}\,\delta\psi_i + \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu \psi_i}\,\partial_\mu \delta\psi_i + \left(\frac{\partial l}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}} \delta x_\mu \\ &+ \left(l\,\delta_{\mu\lambda} - \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu \psi_i}\,\partial_\lambda \psi_i\right) \partial_\mu \delta x_\lambda\Big]\,\mathrm{d}^4x, \end{aligned} \tag{7}$$

wofür man — in Analogie zu Gl. (1.2–8) — auch schreiben kann

$$\begin{aligned} \delta(l\,\mathrm{d}^4x) = \Big\{&\left(\frac{\partial l}{\partial \psi_i} - \partial_\mu \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu \psi_i}\right) \delta\psi_i \\ &+ \left[\left(\frac{\partial l}{\partial x_\lambda}\right)_{\mathrm{ex}} - \partial_\mu \theta_{\mu\lambda}\right] \delta x_\lambda \\ &+ \partial_\mu \left[\frac{\partial l}{\partial\partial_\mu \psi_i}\,\delta\psi_i + \theta_{\mu\lambda}\,\delta x_\lambda\right]\Big\} \cdot \mathrm{d}^4x\,. \end{aligned} \tag{8}$$

Dabei wurde als Abkürzung

$$\boxed{\theta_{\mu\lambda} = l\,\delta_{\mu\lambda} - \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\,\partial_\lambda\psi_i} \tag{9}$$

der „*kanonische Energie-Impulstensor*" eingeführt.[1]) Die zweite Zeile in Gl. (8) läßt sich wieder in Analogie zu Gl. (1.2–9) umformen in

$$\left(\frac{\partial l}{\partial x_\lambda}\right)_{\text{ex}} - \partial_\mu\theta_{\mu\lambda} = -\left(\frac{\partial l}{\partial\psi_i} - \partial_\mu\,\frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\right)\partial_\lambda\psi_i\,, \tag{10}$$

so daß jetzt die Variation des Wirkungsintegrals lautet

$$\begin{aligned}\delta\int_\Gamma l\,\mathrm{d}^4x &= \int_\Gamma\left(\frac{\partial l}{\partial\psi_i} - \partial_\mu\,\frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\right)(\delta\psi_i - \partial_\lambda\psi_i\cdot\delta x_\lambda)\,\mathrm{d}^4x \\ &+ \int_V\left[l\,\delta x_\mu + \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\,(\delta\psi_i - \partial_\lambda\psi_i\cdot\delta x_\lambda)\right]\mathrm{d}f_\mu = 0\,.\end{aligned} \tag{11}$$

Dabei ist das vierdimensionale Integral über die dritte Zeile von Gl. (8), das eine Divergenz im $\mathfrak{r}$, t-Raum ist, in ein Integral über die dreidimensionale Oberfläche = Volumen V (Flächenelement $\mathrm{d}f_\mu$), die diesen vierdimensionalen Raum begrenzt, verwandelt worden (vgl. Fig. 25, dort ist V die Begrenzungskurve von Γ).

Da die Variation auf der Begrenzung V wieder verschwinden soll, ist die zweite Zeile von Gl. (11) Null. Das vierdimensionale Integral der ersten Zeile verschwindet bei beliebigen Variationen $\delta\psi_i$ und δx_λ nur, wenn der Integrand verschwindet: Man erhält die zum vierdimensionalen Variationsproblem gehörigen LAGRANGEschen *Gleichungen*

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\,\frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i} = \frac{\partial l}{\partial\psi_i}}\,, \tag{12}$$

die die *Feldgleichungen* für $\psi_i(x_\mu)$ darstellen sollen. Zerlegt man die linke Seite in die räumlichen ($\alpha = 1, 2, 3$) und zeitlichen Ableitungen, so lauten diese partiellen Differentialgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\,\frac{\partial l}{\partial\partial_\alpha\psi_i} + \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial l}{\partial\dot\psi_i} = \frac{\partial l}{\partial\psi_i}\,. \tag{13}$$

§ 2. Der kanonische Energie-Impulstensor

Setzt man in Gl. (10) die Feldgleichungen (12) ein, so erhält man für die Divergenz des Energie-Impulstensors (9)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\,\theta_{\mu\lambda} = \left(\frac{\partial l}{\partial x_\lambda}\right)_{\text{ex}}}\,. \tag{14}$$

[1]) Nur bei relativistisch invarianten Feldern ist eigentlich die Bezeichnung „Tensor" angebracht. In diesen transformieren sich die Größen (9) tatsächlich wie die Komponenten eines Tensors im vierdimensionalen Raum.

Ist also l von den Raum-Zeit-Punkten explizit nicht abhängig (isolierte Felder), so ist der vierdimensionale Energie-Impulstensor *divergenzfrei*.

Wir zerlegen nun den Energie-Impulstensor nach den räumlichen und zeitlichen Komponenten

$$\begin{pmatrix} \theta_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} & \theta_{\alpha 4} = \frac{i}{c}\, s_\alpha \\ \theta_{4\beta} = i c\, p_\beta & \theta_{44} = -w \end{pmatrix} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3) \tag{15}$$

und erhalten damit die folgenden Observablen (Dichten) des Feldes:

Impulsströmung (Spannungstensor) $$\sigma_{\alpha\beta} = l\,\delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi_i}\,\partial_\beta \psi_i, \tag{16}$$

Impulsdichte $$\mathfrak{p} = -\frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}\,\operatorname{grad} \psi_i, \tag{17}$$

Energieströmung $$\mathfrak{s} = \frac{\partial l}{\partial \operatorname{grad} \psi_i}\,\dot{\psi}_i, \tag{18}$$

Energiedichte $$w = \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}\,\dot{\psi}_i - l. \tag{19}$$

Für diese Größen gilt nach Gl. (14)

$$\mathfrak{div}\,\sigma + \frac{\partial \mathfrak{p}}{\partial t} = (\operatorname{grad} l)_{\mathrm{ex}}, \tag{20}$$

$$\operatorname{div} \mathfrak{s} + \frac{\partial w}{\partial t} = -\left(\frac{\partial l}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}. \tag{21}$$

Wir multiplizieren diese Gleichungen nun mit dem dreidimensionalen Volumelement d^3x und integrieren über den Ortsraum. Dann lassen sich die beiden ersten Terme jeweils in ein Oberflächenintegral verwandeln, dessen Integranden im Unendlichen verschwinden. Der Rest ergibt

$$\frac{d}{dt}\int \mathfrak{p}\, d^3x = \int (\operatorname{grad} l)_{\mathrm{ex}}\, d^3x, \tag{20a}$$

$$\frac{d}{dt}\int w\, d^3x = -\int \left(\frac{\partial l}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} d^3x. \tag{21a}$$

Für isolierte Felder sind die rechten Seiten Null, d. h., der Gesamtfeldimpuls

$$\mathfrak{P} = \int \mathfrak{p}\, d^3x \tag{22}$$

und die Gesamtfeldenergie

$$W = \int w\, d^3x \tag{23}$$

sind konstant.

Die Berechtigung für die Bezeichnungen „Impuls" und „Energie" zieht man aus dem Transformationsverhalten gegenüber Raum- und Zeittranslationen: Wie wir in § 4 noch genauer sehen werden, muß bei Invarianz gegen Translation im Raum die rechte Seite von Gl. (20a) verschwinden, und (22) ist als Folge davon konstant. Da in der Mechanik der Impuls bei derselben Invarianz konstant ist (und dadurch definiert wird), ist man daher auch für Felder berechtigt, (22) als

Gesamtfeldimpuls zu bezeichnen. Entsprechendes gilt für die Energie, wenn man die Zeittranslationen betrachtet.

An dieser Stelle sei schließlich noch darauf hingewiesen, daß man zu $\theta_{\mu\lambda}$ noch irgendeinen divergenzfreien Tensor $A_{\mu\lambda}$ (mit $\partial_\mu A_{\mu\lambda} = 0$) hinzufügen kann, ohne daß sich dadurch in den Aussagen von Gl. (14) und (20) bis (23) etwas verändert.[1])

§ 3. Beispiel: Das Schrödingersche Materiefeld

Das SCHRÖDINGER-Feld unter dem Einfluß eines äußeren Potentials $V(\mathfrak{r})$ wird durch die LAGRANGE-Funktion

$$l = -\frac{\hbar}{i}\,\psi^*\dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\,\mathrm{grad}\,\psi^*\,\mathrm{grad}\,\psi - V\psi^*\psi \tag{24}$$

beschrieben. Dabei werden — wie bereits erwähnt — ψ und ψ^* als voneinander unabhängig zu variierende Feldgrößen betrachtet ($\psi_i \to \psi,\ \psi^*$). Aus der LAGRANGEschen Gleichung

$$\frac{\partial l}{\partial \psi^*} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\,\frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi^*} + \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}^*}$$

folgt in der Tat die SCHRÖDINGERsche Feldgleichung

$$-\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi = V\psi, \tag{25}$$

während sich aus

$$\frac{\partial l}{\partial \psi} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\,\frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi} + \frac{\partial}{\partial t}\,\frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}}$$

die zu (25) konjugiert komplexe SCHRÖDINGERsche Feldgleichung ergibt.

Aus dem kanonischen Energie-Impulstensor

$$\theta_{\mu\lambda} = l\,\delta_{\mu\lambda} - \frac{\partial l}{\partial \partial_\mu \psi}\,\partial_\lambda \psi - \frac{\partial l}{\partial \partial_\mu \psi^*}\,\partial_\lambda \psi^*$$

erhalten wir als

$$\left.\begin{aligned}
&\text{Impulsströmung} && \sigma_{\alpha\beta} = \theta_{\alpha\beta} = l\,\delta_{\alpha\beta} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_\alpha}\,\frac{\partial \psi}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha}\,\frac{\partial \psi^*}{\partial x_\beta}\right),\\
&\text{Impulsdichte} && \mathfrak{p} = \frac{\hbar}{i}\,\psi^*\,\mathrm{grad}\,\psi,\\
&\text{Energieströmung} && \mathfrak{s} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathrm{grad}\,\psi^*\,\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathrm{grad}\,\psi\,\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right),\\
&\text{Energiedichte} && w = \frac{\hbar^2}{2m}\,\mathrm{grad}\,\psi^*\,\mathrm{grad}\,\psi + V\psi^*\psi.
\end{aligned}\right\} \tag{26}$$

Dies sind genau dieselben Ausdrücke, die wir bereits im Kap. 1.4 durch explizite Rechnung gewonnen haben. Die Behandlung im Kalkül der LAGRANGE-Funktion ist natürlich mit der dort angestellten Rechnung im wesentlichen identisch.

[1]) $\partial_\mu A_{\mu\lambda} = 0$ wird durch $A_{\mu\lambda} = \partial_\varrho K_{\varrho\mu\lambda}$ mit $K_{\varrho\mu\lambda} = -K_{\mu\varrho\lambda}$ gewährleistet. Wegen $K_{44\lambda} = 0$ gilt daher $\int A_{4\lambda}\,d^3x = \int K_{\alpha 4\lambda}\,df_\alpha = 0$, d. h. $\mathfrak{P}$ und W sind unabhängig von $A_{4\lambda}$.

§ 4. Symmetrie und Erhaltungssätze eines Feldes

a) Allgemeine Formulierung

Das Theorem von NOETHER (1.2 § 3) über den Zusammenhang zwischen Symmetrietransformation und Erhaltungssätzen läßt sich auch für Felder formulieren. Wir betrachten dazu zunächst wieder eine beliebige Transformation der unabhängigen und abhängigen Variablen

$$\left.\begin{aligned} x'_\mu &= x'_\mu(x_1, \ldots, x_4), \\ \psi'_i &= \psi'_i(\psi_1, \ldots, \psi_f; x_1, \ldots, x_4) \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

oder, aufgelöst nach den alten Variablen,

$$\left.\begin{aligned} x_\mu &= x_\mu(x'_1, \ldots, x'_4), \\ \psi_i &= \psi_i(\psi'_1, \ldots, \psi'_f; x'_1, \ldots, x'_4). \end{aligned}\right\} \tag{27a}$$

Durch Einsetzen dieser Transformation in $l\,\mathrm{d}^4x$ wird eine neue LAGRANGE-Funktion l' der neuen Variablen definiert,

$$l(\psi_i, \partial_\mu\psi_i, x_\mu)\,\mathrm{d}^4x = l'(\psi'_i, \partial_{\mu'}\psi'_i, x'_\mu)\,\mathrm{d}^4x' \qquad \left(\partial_{\mu'} = \frac{\partial}{\partial x'_\mu}\right). \tag{28}$$

Die Feldgleichungen sind *invariant* gegenüber einer Transformation, wenn die neue LAGRANGE-Funktion mit der alten LAGRANGE-Funktion, geschrieben in den neuen Variablen, übereinstimmt, oder sich um die vierdimensionale Divergenz von Funktionen $\Omega_{\mu'}(\psi'_i, x'_\mu)$ unterscheidet (weil die LAGRANGEschen Gleichungen für einen Divergenzausdruck identisch erfüllt sind, vgl. Aufg. 3),

$$l'(\psi'_i, \partial_{\mu'}\psi'_i, x'_\mu) = l(\psi'_i, \partial_{\mu'}\psi'_i, x'_\mu) + \partial_{\mu'}\Omega_{\mu'}. \tag{29}$$

Wegen Gl. (28) erhalten wir damit als *Symmetriebedingung*

$$l(\psi_i, \partial_\mu\psi_i, x_\mu)\,\mathrm{d}^4x = l(\psi'_i, \partial_{\mu'}\psi'_i, x'_\mu)\,\mathrm{d}^4x' + \partial_{\mu'}\Omega_{\mu'}\,\mathrm{d}^4x'. \tag{30}$$

Wir wollen nun speziell wieder solche Symmetrietransformationen betrachten, die eine kontinuierliche Gruppe (vgl. Anhang 5.4 § 2) bilden, so daß wir uns auf die Behandlung *infinitesimaler Transformationen* beschränken können,

$$\begin{aligned} x'_\mu &= x_\mu + \mathfrak{d}x_\mu, \\ \psi'_i &= \psi_i + \mathfrak{d}\psi_i, \\ \partial_{\mu'}\psi'_i &= \partial_\mu\psi_i + \mathfrak{d}\,\partial_\mu\psi_i. \end{aligned} \tag{31}$$

Die weitere Analyse geschieht wieder wie in 1.2 § 3: Aus Gl. (30) wird infinitesimal

$$\mathfrak{d}(l\,\mathrm{d}^4x) + \partial_\mu\mathfrak{d}\Omega_\mu\,\mathrm{d}^4x = 0. \tag{32}$$

Ersetzen wir in Gl. (7) die Variation δ durch die Symmetrietransformation $\mathfrak{d}$, so erhält man

$$\boxed{\frac{\partial l}{\partial\psi_i}\,\mathfrak{d}\psi_i + \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\,\partial_\mu\mathfrak{d}\psi_i + \left(\frac{\partial l}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}}\mathfrak{d}x_\mu + \theta_{\mu\lambda}\,\partial_\mu\mathfrak{d}x_\lambda + \partial_\mu\mathfrak{d}\,\Omega_\mu = 0}\,. \tag{33}$$

Diese Bedingungsgleichung muß die LAGRANGE-*Funktion erfüllen, damit die Transformation* (31) *die Feldgleichungen invariant läßt.* Da die Felder die Gl. (12) und (14) erfüllen, folgt hieraus unmittelbar die *Divergenzfreiheit*

$$\boxed{\partial_\mu \left[\frac{\partial l}{\partial \partial_\mu \psi_i}\, \delta\psi_i + \theta_{\mu\lambda}\delta x_\lambda + \delta\Omega_\mu\right] = 0}\,. \tag{34}$$

Wir bezeichnen den in der Klammer stehenden Ausdruck vorübergehend mit $g_\mu = (\mathfrak{g}, i c g_t)$ und zerlegen die vierdimensionale Divergenz in eine dreidimensionale und eine zeitliche Ableitung,

$$\partial_\mu g_\mu = \operatorname{div} \mathfrak{g} + \dot{g}_t = 0\,.$$

Integrieren wir über das dreidimensionale Volumen, so wird nach dem GAUSSschen Satz der erste Teil

$$\int_V \operatorname{div} \mathfrak{g}\, \mathrm{d}^3x = \int_F \mathfrak{g}\, \mathrm{d}\mathfrak{f} = 0$$

ein zweidimensionales Oberflächenintegral, dessen Integrand im Unendlichen verschwindet. Man erhält also

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_V g_t\, \mathrm{d}^3x = 0\,.$$

Berücksichtigen wir die Definition (15) für den Feldimpuls $\mathfrak{p}$ und die Feldenergie w, so ergibt sich, daß das Volumintegral

$$\boxed{\int_V \left(\frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}\, \delta\psi_i + \mathfrak{p}\,\delta\mathfrak{r} - w\,\delta t + \delta\Omega_t\right) \mathrm{d}^3x = \text{const}} \tag{35}$$

als Folge der Symmetrie zeitlich konstant ist (*Erhaltungsgröße des Feldes*).

Größen, die in der Punktmechanik und in der Feldtheorie gegenüber denselben Symmetrietransformationen invariant sind, stellen denselben physikalischen Begriff dar, wenngleich sie in beiden Bildern völlig verschieden realisiert sind. Wir können daher solche Observable des Teilchen- und Feldbildes mit *demselben Namen* bezeichnen (z. B. Energie, Impuls).

b) Beispiele

1. *Translation der Zeit* (*Energieerhaltung*):

Ein Feld ist invariant gegenüber einer infinitesimalen Zeittranslation

$$\delta t = \text{const}, \quad \delta\mathfrak{r} = 0, \quad \delta\psi_i = 0, \quad \delta\Omega_\mu = 0\,, \tag{36}$$

wenn nach Gl. (33) l explizit zeitunabhängig ist. Entsprechend Gl. (35) ist dann das Integral

$$W = \int w\, \mathrm{d}^3x = -\int \theta_{44}\, \mathrm{d}^3x \tag{37}$$

konstant. Diese Größe ist somit als die gesamte Feldenergie zu interpretieren.

2. *Translationen im Raum (Impulserhaltung)*:

$$\mathfrak{d}\mathfrak{r} = \text{const}, \quad \mathfrak{d}t = 0, \quad \mathfrak{d}\psi_i = 0, \quad \mathfrak{d}\Omega_\mu = 0. \tag{38}$$

Damit diese Invarianz erfüllt ist, muß l ortsunabhängig sein, d. h., es dürfen keine äußeren Kräfte auf das Feld wirken. Nach Gl. (35) ist dann der gesamte Feldimpuls

$$\mathfrak{P} = \int \mathfrak{p}\, d^3x = -\int \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i} \operatorname{grad} \psi_i\, d^3x \tag{39}$$

konstant (Beispiel: SCHRÖDINGER-Feld im konstanten Potential).

3. *Drehung im Ortsraum (Drehimpulserhaltung)*:
Eine linear homogene Transformation der Ortskoordinaten

$$x'_\alpha = x_\beta C_{\beta\alpha} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3) \tag{40}$$

st bekanntlich eine Drehung, wenn die Matrix C die Orthogonalitätsrelationen

$$C_{\alpha\beta} C_{\alpha\gamma} = \delta_{\beta\gamma} \tag{41}$$

erfüllt und det $C_{\alpha\beta} = 1$ ist. Für eine infinitesimale Drehung setzen wir an

$$C_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} + \varepsilon_{\beta\alpha}. \tag{42}$$

Die infinitesimale Matrix ε muß antimetrisch sein

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = -\varepsilon_{\beta\alpha}, \tag{43}$$

wie man sofort sieht, wenn man Gl. (42) in Gl. (41) einsetzt und quadratische Terme in ε vernachlässigt. Die drei Zahlen $\varepsilon_{23}, \varepsilon_{31}, \varepsilon_{12}$ bedeuten die infinitesimalen Drehwinkel um die drei Koordinatenachsen x_1, x_2, x_3.

Haben wir ein *skalares* Feld vor uns (das sich also bei Drehungen im Ortsraum nicht verändert), so ist die infinitesimale Drehung durch

$$\mathfrak{d}x_\alpha = x_\beta \varepsilon_{\beta\alpha}, \ \mathfrak{d}t = 0, \ \mathfrak{d}\psi_i = 0, \ \mathfrak{d}\Omega_\mu = 0 \tag{44}$$

charakterisiert. Nach Gl. (33) führt dies auf die Bedingungsgleichung für Drehinvarianz

$$\left(\frac{\partial l}{\partial x_\alpha}\right)_{\text{ex}} x_\beta \varepsilon_{\beta\alpha} + \theta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} = 0. \tag{45}$$

Bezüglich einer Drehung um die 3-Achse lautet dieses Ergebnis

$$-\left(\frac{\partial l}{\partial x_1}\right)_{\text{ex}} x_2 + \left(\frac{\partial l}{\partial x_2}\right)_{\text{ex}} x_1 + \theta_{12} - \theta_{21} = 0.$$

Die beiden ersten Terme sind das Moment der äußeren Kraft $\mathfrak{k} = (\operatorname{grad} l)_{\text{ex}}$. Verschwindet insbesondere dieses Moment, so lautet die Bedingung für die Drehinvarianz, daß der Spannungstensor $\theta_{\alpha\beta}$ *symmetrisch* sein muß,

$$\theta_{\alpha\beta} = \theta_{\beta\alpha} \qquad (\alpha, \beta = 1, 2, 3). \tag{46}$$

Beim SCHRÖDINGER-Feld (§ 3) ist diese Bedingung in der Tat erfüllt.

Als Folge der Invarianz gegenüber Drehungen erhalten wir nach Gl. (34)

$$\partial_\mu(\theta_{\mu\alpha}x_\beta - \theta_{\mu\beta}x_\alpha) = 0 \qquad \begin{matrix}(\mu = 1, \ldots, 4) \\ (\alpha, \beta = 1, 2, 3)\end{matrix} \tag{47}$$

und nach Integration über den Ortsraum

$$\mathfrak{L} = \int (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p})\, d^3x = \text{const}, \tag{48}$$

d. h., der Gesamtdrehimpuls des Feldes ist konstant.

Bei relativistisch invarianten Feldern tritt an Stelle von Gl. (40) die *vierdimensionale* LORENTZ-*Transformation.* Ist das Feld ein Skalar ($\delta\psi_i = 0$), so ergibt sich (bei Abwesenheit eines Momentes) als *Bedingung für* LORENTZ-*Invarianz die Symmetrie des gesamten kanonischen Energie-Impulstensors*

$$\theta_{\mu\nu} = \theta_{\nu\mu} \tag{49}$$

und als Folge davon simultan der *Drehimpuls- und Schwerpunktsatz*[1]).

Sind die Felder *nicht skalar,* sondern z. B. ein Vektor oder Spinor, so transformieren sich bei Drehungen auch die Komponenten des Feldes untereinander, und es ist $\delta\psi_i \neq 0$ zu berücksichtigen. In diesem Fall wird zum kanonischen Energie-Impulstensor $\theta_{\mu\nu}$ ein divergenzfreier Tensor $A_{\mu\nu}$ hinzugefügt (vgl. S. 97),

$$T_{\mu\nu} = \theta_{\mu\nu} + A_{\mu\nu} \quad (\partial_\mu A_{\mu\nu} = 0), \tag{50}$$

und die Bedingung der LORENTZ-Invarianz manifestiert sich in der Symmetrie

$$T_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}. \tag{51}$$

Dies hat zur Folge, daß bei Abwesenheit eines äußeren Feldes nicht der Bahndrehimpuls, sondern

$$\mathfrak{J} = \mathfrak{L} + \mathfrak{S} \tag{52}$$

konstant ist, wobei der *Spin* $\mathfrak{S}$ ein Vektor im Ortsraum ist, der durch das Verhalten der Feldkomponenten ψ_i gegenüber Drehungen bestimmt wird. Im Gegensatz zu $\mathfrak{L}$ erweist sich der Vektor $\mathfrak{S}$ bezugspunkt*un*abhängig [2]), er ist eine innere Eigenschaft des Feldes.

4. *Phaseninvarianz (Ladungserhaltung)*:

Die LAGRANGE-Funktion l sei invariant gegenüber einer Phasentransformation der *komplexen* Feldfunktion,

$$\begin{aligned} \psi_i \to \psi_i' &= e^{i\vartheta}\psi_i, \\ \psi_i^* \to \psi_i^{*\prime} &= e^{-i\vartheta}\psi_i^*. \end{aligned} \tag{53}$$

Die infinitesimale Transformation dieser einparametrigen Gruppe ist daher durch

$$\delta\psi_i = i\vartheta\psi_i, \quad \delta\psi_i^* = -i\vartheta\psi_i^* \tag{54}$$

gegeben. Die Gl. (33) besagt (der Stern ist als weiterer Index zu lesen!), daß die LAGRANGE-Funktion die Relation

$$\frac{\partial l}{\partial\psi_i}\psi_i - \frac{\partial l}{\partial\psi_i^*}\psi_i^* + \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i}\partial_\mu\psi_i - \frac{\partial l}{\partial\partial_\mu\psi_i^*}\partial_\mu\psi_i^* = 0 \tag{55}$$

---

[1]) In nichtrelativistischen Feldern ist der Schwerpunktsatz eine Folge der GALILEI-Transformation (vgl. Aufg. 23).

[2]) Nach [1]) S. 97 folgt nämlich $\int (A_{4\alpha}x_\beta - A_{4\beta}x_\alpha)\, d^3x = -\int (K_{\beta4\alpha} - K_{\alpha4\beta})\, d^3x$.

erfüllen muß, damit Phaseninvarianz gewährleistet ist. Wenn das aber der Fall ist, so sind nach Gl. (34) die Größen

$$j_\mu = C\left(\frac{\partial l}{\partial \partial_\mu \psi_i}\,\psi_i - \frac{\partial l}{\partial \partial_\mu \psi_i^*}\,\psi_i^*\right) \tag{56}$$

divergenzfrei (C ist eine noch willkürlich wählbare Konstante),

$$\partial_\mu j_\mu = 0. \tag{57}$$

Die Phaseninvarianz eines komplexen Feldes führt also auf eine Kontinuitätsgleichung. Die Komponenten von $j_\mu = (\mathfrak{i}, \mathrm{i}c\varrho)$ interpretiert man (bei geeigneter Wahl von C) als *elektrische Strom- und Raumladungsdichte* des Feldes,

$$\begin{aligned} \mathfrak{i}_k &= C\left(\frac{\partial l}{\partial \partial_k \psi_i}\,\psi_i - \frac{\partial l}{\partial \partial_k \psi_i^*}\,\psi_i^*\right), \\ \varrho &= C\left(\frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}\,\psi_i - \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i^*}\,\psi_i^*\right) \end{aligned} \tag{58}$$

mit

$$\operatorname{div} \mathfrak{i} + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0. \tag{57a}$$

Die *Gesamtladung* des Feldes

$$Q = \int \varrho \,\mathrm{d}^3x \tag{59}$$

ist bei Phaseninvarianz zeitlich konstant.

Setzt man insbesondere die LAGRANGE-Funktion des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes [Gl. (24)] ein, so erhält man gerade wieder die Ausdrücke von Strom und Ladung $\left(\text{mit } C = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,q\right)$, welche wir in 1.4 § 1 durch explizite Rechnung gewonnen haben.

Aufg. 23: Man untersuche die Invarianz der kräftefreien SCHRÖDINGERschen Materiefeldgleichung gegen GALILEI-Transformationen.

§ 5. Kanonische Feldgrößen und Hamilton-Dichte eines Feldes

Analog zur Punktmechanik definiert man durch

$$\boxed{\pi_i = \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}} \tag{60}$$

„*kanonische Feldgrößen*", konjugiert zu den Feldamplituden ψ_i. Wir wollen annehmen, daß die entstehenden Funktionen $\pi_i = \pi_i(\psi_i, \operatorname{grad}\psi_i, \dot{\psi}_i, x_\mu)$ nach $\dot{\psi}_i$ aufzulösen sind,

$$\dot{\psi}_i = \dot{\psi}_i(\psi_i, \pi_i, \operatorname{grad}\psi_i, x_\mu), \tag{61}$$

so daß man an Stelle von $\dot{\psi}_i$ die kanonische Feldgröße π_i verwenden kann. Die für diese Auflösung erforderliche Bedingung

$$\det \frac{\partial \pi_i}{\partial \dot{\psi}_k} = \det \frac{\partial^2 l}{\partial \dot{\psi}_i\, \partial \dot{\psi}_k} \neq 0 \tag{62}$$

ist jedoch leider bei vielen physikalisch auftretenden Feldern nicht erfüllt. In diesen Fällen muß das im folgenden gegebene Verfahren durch geschickte, auf das spezielle Problem zugeschnittene Überlegungen modifiziert werden, z. B. kann man von den dann untereinander abhängigen Variablen ψ_i und π_i durch Elimination zu einem kleineren Satz von unabhängigen Variablen ψ_j und π_j übergehen. Diese Methode werden wir weiter unten am Beispiel des SCHRÖDINGER-Feldes demonstrieren. Zunächst wollen wir uns jedoch mit dem Fall beschäftigen, in dem die Auflösung (61) durchführbar ist.

Wir definieren als HAMILTON-*Dichte des Feldes*

$$\boxed{h = \pi_i \dot{\psi}_i - l}\,, \tag{63}$$

die nach Gl. (61) eine Funktion

$$h = h(\psi_i, \pi_i, \operatorname{grad} \psi_i, x_\mu) \tag{64}$$

wird. Sie ist mit der Energiedichte des Feldes [Gl. (19)] identisch. Für die totale Veränderung von h erhalten wir ($\alpha = 1, 2, 3$)

$$\begin{aligned} \mathrm{d}h &= \frac{\partial h}{\partial \psi_i}\,\mathrm{d}\psi_i + \frac{\partial h}{\partial \pi_i}\,\mathrm{d}\pi_i + \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \psi_i}\,\mathrm{d}\partial_\alpha \psi_i + \left(\frac{\partial h}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}} \mathrm{d}x_\mu \\ &= \pi_i\,\mathrm{d}\dot{\psi}_i + \dot{\psi}_i\,\mathrm{d}\pi_i - \frac{\partial l}{\partial \psi_i}\,\mathrm{d}\psi_i - \frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi_i}\,\mathrm{d}\partial_\alpha \psi_i - \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}\,\mathrm{d}\dot{\psi}_i - \left(\frac{\partial l}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}} \mathrm{d}x_\mu . \end{aligned}$$

Dabei kürzt sich nach Gl. (60) in der zweiten Zeile der erste Term gegen den vorletzten weg, und man erhält durch Vergleich der verbleibenden, unabhängigen Differentiale

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}\pi_i: \quad \dot{\psi}_i = \frac{\partial h}{\partial \pi_i}, \qquad &&\mathrm{d}\partial_\alpha\psi_i: \quad -\frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi_i} = \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \psi_i}, \\ &\mathrm{d}\psi_i: \quad -\frac{\partial l}{\partial \psi_i} = \frac{\partial h}{\partial \psi_i}, \qquad &&\mathrm{d}x_\mu: \quad -\left(\frac{\partial l}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}} = \left(\frac{\partial h}{\partial x_\mu}\right)_{\mathrm{ex}}. \end{aligned}$$

Berücksichtigt man noch die LAGRANGEschen Gleichungen (13), so erhält man daraus die *Feldgleichungen* in der HAMILTONschen Form

$$\left.\begin{aligned} \dot{\psi}_i &= \frac{\partial h}{\partial \pi_i}, \\ \dot{\pi}_i &= -\frac{\partial h}{\partial \psi_i} + \partial_\alpha \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \psi_i}. \end{aligned}\right\} \tag{65}$$

Ergeben sich bei der Auflösung (61) abhängige Variable ψ_i und π_i, so führt das erwähnte Eliminationsverfahren dazu, daß in dem verbleibenden *un*abhängigen Satz ψ_j und π_j die HAMILTON-Dichte auch eine Funktion von grad π_j wird,

$$h = h(\psi_j, \pi_j, \operatorname{grad} \psi_j, \operatorname{grad} \pi_j, x_\mu). \tag{66}$$

In diesem Fall nehmen die HAMILTONschen *Gleichungen für ein Feld* die allgemeinere Form

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{\psi}_j &= + \frac{\partial h}{\partial \pi_j} - \partial_\alpha \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \pi_j} \\ \dot{\pi}_j &= - \frac{\partial h}{\partial \psi_j} + \partial_\alpha \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \psi_j} \end{aligned}} \tag{67}$$

an.

Beispiel: Das SCHRÖDINGER*sche Materiefeld.* Aus der LAGRANGE-Funktion (24) erhalten wir, wenn wir ψ und ψ^* als unabhängige Feldvariable ansehen, für die zugehörigen kanonischen Feldgrößen

$$\pi = -\frac{\hbar}{i}\psi^*, \quad \pi^* = 0.^{1)} \tag{68}$$

In der LAGRANGE-Funktion (24) tritt $\dot{\psi}$ nur linear auf, so daß π keine Funktion von $\dot{\psi}$ wird. Wir können daher $\dot{\psi}$ nicht durch π ersetzen! Weil π proportional ψ^* ist und π^* verschwindet, bilden die Größen ψ, ψ^*, π, π^* gar keinen Satz unabhängiger Variabler. Es genügt daher, allein

$$\boxed{\psi \text{ und } \pi = -\frac{\hbar}{i}\psi^*} \tag{69}$$

als unabhängige, kanonisch konjugierte Feldgrößen einzuführen ($j = 1$). Für die HAMILTON-Dichte

$$h = \pi\dot{\psi} - l$$

erhalten wir damit

$$h = \frac{\hbar}{2mi}\operatorname{grad}\pi\operatorname{grad}\psi - \frac{i}{\hbar}V\pi\psi. \tag{70}$$

Die HAMILTONschen Gleichungen (67) ergeben

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_i &= -\frac{i}{\hbar}V\psi - \frac{\hbar}{2mi}\Delta\psi, \\ \dot{\pi} &= +\frac{i}{\hbar}V\pi + \frac{\hbar}{2mi}\Delta\pi, \end{aligned}$$

also gerade die SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung für ψ und $\pi = -\frac{\hbar}{i}\psi^*$.

§ 6. Die integrale Lagrange- und Hamilton-Funktion

Die LAGRANGEschen und HAMILTONschen Gleichungen für ein Feld nehmen völlig die Form der punktmechanischen Gleichungen an, wenn man von den Dichten l und h zu den räumlich integralen Größen

$$L = \int l \, d^3x \quad \text{und} \quad H = \int h \, d^3x \tag{71}$$

übergeht. Zwischen diesen besteht der Zusammenhang

$$H = \int \pi_i \dot{\psi}_i \, d^3x - L. \tag{72}$$

---

1) π^* ist also nicht zu π konjugiert komplex. Der Stern spielt lediglich die Rolle eines Index!

Die integrale LAGRANGE-Funktion L ist ein *Funktional* (vgl. Anhang, Kap. 5.2)

$$L = L[\psi_i, \dot{\psi}_i]. \tag{73}$$

Zwischen den Funktionalableitungen von L und den partiellen Ableitungen von l besteht der Zusammenhang (Gl. 5.2–15)

$$\frac{\delta L}{\delta \psi_i} = \frac{\partial l}{\partial \psi_i} - \partial_\alpha \frac{\partial l}{\partial \partial_\alpha \psi_i}, \qquad \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_i} = \frac{\partial l}{\partial \dot{\psi}_i}, \tag{74}$$

so daß die LAGRANGEschen Feldgleichungen (13) in der integralen LAGRANGE-Funktion L lauten

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_i} = \frac{\delta L}{\delta \psi_i}}. \tag{75}$$

In entsprechender Weise lassen sich auch die HAMILTONschen Gleichungen eines Feldes umformulieren. Die integrale HAMILTON-Funktion H ist ein Funktional

$$H = H[\psi_j, \pi_j], \tag{76}$$

dessen Funktionalableitungen mit den partiellen Ableitungen von h [Gl. (66)] durch

$$\frac{\delta H}{\delta \psi_j} = \frac{\partial h}{\partial \psi_j} - \partial_\alpha \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \psi_j}, \qquad \frac{\delta H}{\delta \pi_j} = \frac{\partial h}{\partial \pi_j} - \partial_\alpha \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \pi_j} \tag{77}$$

verbunden sind. Die Feldgleichungen (67) nehmen damit die HAMILTONsche Gestalt

$$\boxed{\dot{\psi}_j = \frac{\delta H}{\delta \pi_j}, \quad \dot{\pi}_j = -\frac{\delta H}{\delta \psi_j}} \tag{78}$$

an.

Aufg. 24: Man stelle grad ψ_j und grad π_j durch Funktionalableitung des Gesamtfeldimpulses $\mathfrak{P}$ dar.

§ 7. Formulierung in den Amplituden von Partialwellen

Wir entwickeln die kanonischen Feldgrößen entsprechend den Überlegungen 1.5 § 7 nach einem vollständigen, orthonormierten Funktionensystem

$$\psi_i(\mathfrak{r}, t) = \sum_k\!\!\!\!\!\int c_i(k, t)\, v_k(\mathfrak{r})\, dk, \qquad \pi_i(\mathfrak{r}, t) = \sum_k\!\!\!\!\!\int d_i(k, t)\, v_k^*(\mathfrak{r})\, dk. \quad ^{1)} \tag{79}$$

[1]) Zur Unterscheidung gegenüber dem Index i, der die verschiedenen Feldkomponenten numeriert, schreiben wir jetzt in $c_i(k, t)$ die Variable k, die diskret oder/und kontinuierlich sein kann, als Argument.

Aus reinen Zweckmäßigkeitsgründen haben wir in der zweiten Zeile v_k^* geschrieben. Die Entwicklungskoeffizienten c und d erhält man umgekehrt aus

$$\begin{aligned} c_i(k, t) &= \int \psi_i(\mathfrak{r}, t)\, v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x, \\ d_i(k, t) &= \int \pi_i(\mathfrak{r}, t)\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x. \end{aligned} \tag{80}$$

Setzt man die Entwicklung (79) in die integrale HAMILTON-Funktion (76) ein, so erhält man H als Funktional von c_i und d_i

$$H = \int h\, \mathrm{d}^3x = H\,[c_i, d_i]. \tag{81}$$

Multiplizieren wir die HAMILTONschen Gleichungen (78) mit v_k^* bzw. v_k und integrieren über den Ort, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \dot{c}_i(k) &= \int \frac{\delta H}{\delta \pi_i}\, v_k^*\, \mathrm{d}^3x = \int \frac{\delta H}{\delta \pi_i} \frac{\delta \pi_i}{\delta d_i(k)}\, \mathrm{d}^3x, \\ \dot{d}_i(k) &= -\int \frac{\delta H}{\delta \psi_i}\, v_k\, \mathrm{d}^3x = -\int \frac{\delta H}{\delta \psi_i} \frac{\delta \psi_i}{\delta c_i(k)}\, \mathrm{d}^3x. \end{aligned}$$

Damit lauten die HAMILTONschen Gleichungen in den Amplituden $c(k)$ und $d(k)$ der Partialwellen v_k

$$\boxed{\dot{c}_i(k) = \frac{\delta H}{\delta d_i(k)}, \quad \dot{d}_i(k) = -\frac{\delta H}{\delta c_i(k)}}. \tag{82}$$

Ist insbesondere der Index k *diskret*, so wird H eine gewöhnliche Funktion der Entwicklungskoeffizienten c_{ik} und d_{ik} [vgl. Gl. (86)]. In diesem Fall vereinfachen sich die Funktionalableitungen in den HAMILTONschen Gleichungen (82) zu partiellen Differentialquotienten.

§ 8. Beispiel: Das Schrödingersche Materiefeld

Aus der differentiellen HAMILTON-Funktion (70) erhalten wir als integrale HAMILTON-Funktion des SCHRÖDINGER-Feldes

$$\begin{aligned} H[\pi, \psi] &= \int \left(\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}} \operatorname{grad} \pi \operatorname{grad} \psi - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, V \pi \psi\right) \mathrm{d}^3x \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int \pi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V\right) \psi\, \mathrm{d}^3x. \end{aligned} \tag{83}$$

Die zweite Zeile entsteht aus der ersten durch Anwendung des GREENschen Satzes (Fußnote [2]) S. 66). Wegen

$$\pi = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\, \psi^*$$

ist es jedoch zweckmäßiger, an Stelle von π und ψ die zueinander konjugiert komplexen Größen ψ^* und ψ als unabhängige Variable zu verwenden, d. h.

$$\boxed{H[\psi^*, \psi] = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V\right) \psi\, \mathrm{d}^3x}. \tag{84}$$

Die HAMILTONschen Gleichungen nehmen dann die Form

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi} = \frac{\delta H}{\delta \psi^*} \quad \text{und} \quad \frac{\hbar}{i}\dot{\psi}^* = \frac{\delta H}{\delta \psi} \tag{85}$$

an.

Die Entwicklung des Ausdrucks (84) nach einem vollständigen Funktionensatz $v_k(\mathfrak{r})$ haben wir in 1.5 § 7 bereits vorgenommen. Es ergab sich

$$\boxed{H[c^*, c] = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_k \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k'} c^*(k)\,\varepsilon(k, k')\,c(k')\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k'}. \tag{86}$$

Bei diskretem k wird das Funktional also einfach eine Doppelsumme! Wegen

$$d = -\frac{\hbar}{i} c^*$$

wird aus der ersten HAMILTONschen Gleichung (82)

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}c(k,t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\delta H}{\delta c^*(k)} = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k'} \varepsilon(k, k')\,c(k')\,\mathrm{d}k'. \tag{87}$$

Diese Gestalt der SCHRÖDINGERschen Materiefeldgleichung haben wir bereits in 1.5 § 7a kennengelernt. Die zweite HAMILTONsche Gleichung (82) führt auf die zu (87) konjugiert komplexe Gleichung.

Berücksichtigt man auch die COULOMB*sche Abstoßung* der SCHRÖDINGERschen Materieverteilung, so tritt an die Stelle von Gl. (87) die Relation (1.6–4). Das HAMILTONsche Funktional $H[c^*, c]$ hat daher in diesem Fall die Gestalt

$$H = H_0 + H_W, \tag{88}$$

wobei H_0 wieder durch Gl. (86) gegeben ist, während der Beitrag H_W der Wechselwirkung lautet

$$\boxed{H_W[c^*, c] = \frac{1}{2} \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k_1,\ldots,k_4} c^*(k_1)\,c^*(k_2)\,\varepsilon(k_1, k_2; k_3, k_4)\,c(k_4)\,c(k_3)\,\mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_4} \tag{89}$$

Identifiziert man die $c(k)$ insbesondere mit den Feldamplituden $\psi(\mathfrak{r})$ selbst (1.5 § 7a), d. h., ersetzt man $v_k(\mathfrak{r})$ durch die δ-Funktionen $\delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}_1)$, so erhält man für

$$\begin{aligned}\varepsilon(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2; \mathfrak{r}_3, \mathfrak{r}_4) &= q^2 \iint \frac{\delta(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}_1)\,\delta(\mathfrak{r}'-\mathfrak{r}_2)\,\delta(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}_3)\,\delta(\mathfrak{r}'-\mathfrak{r}_4)}{|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}\,\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x' \\ &= \frac{q^2}{|\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_2|}\,\delta(\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_3)\,\delta(\mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_4),\end{aligned} \tag{90}$$

und aus Gl. (89) wird

$$H_W = \frac{1}{2}\int\cdots\int \psi^*(\mathfrak{r}_1)\,\psi^*(\mathfrak{r}_2)\,\frac{q^2}{|\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_2|}\,\delta(\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_3)\,\delta(\mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_4)\,\psi(\mathfrak{r}_4)\,\psi(\mathfrak{r}_3)\,\mathrm{d}^3x_1\ldots\mathrm{d}^3x_4,$$

oder

$$\boxed{H_W[\psi^*, \psi] = \frac{1}{2}\iint \psi^*(\mathfrak{r}_1)\,\psi^*(\mathfrak{r}_2)\,\frac{q^2}{|\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_2|}\,\psi(\mathfrak{r}_2)\,\psi(\mathfrak{r}_1)\,\mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}^3x_2}. \tag{91}$$

§ 9. Felder im Poisson-Klammer-Formalismus

Im Kalkül der Funktionalableitungen stimmt die mathematische Beschreibung der Felder formal völlig mit jener der Punktsysteme überein. Man kann daher auch für die Felder denselben POISSON-Klammer-Formalismus entwickeln, der uns aus der Mechanik bereits bekannt ist (1.2 § 4).

a) Definition der Poisson-Klammern für Felder

Wir betrachten irgend zwei Feldgrößen F und G, die als Funktionale

$$F[\psi_i, \pi_i] \quad \text{und} \quad G[\psi_i, \pi_i]$$

gegeben seien. Als POISSON-Klammer zwischen diesen beiden Größen verstehen wir den Ausdruck

$$\boxed{\{F, G\} = \sum_k \int \left(\frac{\delta F}{\delta \pi_k(\mathfrak{r})} \frac{\delta G}{\delta \psi_k(\mathfrak{r})} - \frac{\delta G}{\delta \pi_k(\mathfrak{r})} \frac{\delta F}{\delta \psi_k(\mathfrak{r})} \right) \mathrm{d}^3 x} \,. \tag{92}$$

Neben der Summation über die verschiedenen Komponenten k des Feldes tritt also noch eine Integration über die Ortsvariable $\mathfrak{r}$, sie spielt also ebenfalls die Rolle eines Index. Die Beziehungen (1.2–59) bis (1.2–64) gelten natürlich auch für die POISSON-Klammern (92).

Ersetzt man in Gl. (92) G durch $\psi_i(\mathfrak{r}')$, so ergibt sich

$$\{F, \psi_i(\mathfrak{r}')\} = \sum_k \int \frac{\delta F}{\delta \pi_k(\mathfrak{r})} \frac{\delta \psi_i(\mathfrak{r}')}{\delta \psi_k(\mathfrak{r})} \mathrm{d}^3 x .$$

Weil aber (vgl. Anhang Gl. 5.2–10)

$$\frac{\delta \psi_i(\mathfrak{r}')}{\delta \psi_k(\mathfrak{r})} = \delta_{ik}\, \delta(\mathfrak{r}' - \mathfrak{r}) \tag{93}$$

gilt, so erhalten wir

$$\{F, \psi_i(\mathfrak{r}')\} = \frac{\delta F}{\delta \pi_i(\mathfrak{r}')} \tag{94}$$

und entsprechend

$$\{F, \pi_i(\mathfrak{r}')\} = - \frac{\delta F}{\delta \psi_i(\mathfrak{r}')} , \tag{95}$$

also die zu Gl. (1.2–65) analogen Formeln. Für die kanonisch konjugierten Feldgrößen ψ_i und π_i, zur selben Zeit t genommen, gelten somit die POISSON-Klammer-Relationen

$$\boxed{\begin{aligned} &\{\psi_i(\mathfrak{r}', t), \psi_k(\mathfrak{r}'', t)\} = 0, \qquad \{\pi_i(\mathfrak{r}', t), \pi_k(\mathfrak{r}'', t)\} = 0, \\ &\{\pi_i(\mathfrak{r}', t), \psi_k(\mathfrak{r}'', t)\} = \delta_{ik}\, \delta(\mathfrak{r}' - \mathfrak{r}'') \end{aligned}} \,. \tag{96}$$

Im Fall des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes wird aus der letzten Gleichung wegen Gl. (69)

$$\frac{\hbar}{i}\{\psi(\mathfrak{r}', t), \psi^*(\mathfrak{r}'', t)\} = \delta(\mathfrak{r}' - \mathfrak{r}''). \tag{97}$$

b) Die Feldgleichungen in Poisson-Klammern

Für eine beliebige Observable F des Feldes, die als Funktional

$$F = F[\psi_i, \pi_i]$$

vorgegeben sei, lautet (vgl. Anhang Gl. (5.2–9)) die zeitliche Veränderung[1])

$$\dot{F} = \sum_i \int \left(\frac{\delta F}{\delta \psi_i}\dot{\psi}_i + \frac{\delta F}{\delta \pi_i}\dot{\pi}_i\right) d^3x + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{ex}. \tag{98}$$

Berücksichtigen wir andererseits in $\{H, F\}$ die HAMILTONschen Gleichungen (78)

$$\{H, F\} = \sum_i \int \left(\frac{\delta H}{\delta \pi_i}\frac{\delta F}{\delta \psi_i} - \frac{\delta F}{\delta \pi_i}\frac{\delta H}{\delta \psi_i}\right) d^3x$$

$$= \sum_i \int \left(\dot{\psi}_i \frac{\delta F}{\delta \psi_i} + \frac{\delta F}{\delta \pi_i}\dot{\pi}_i\right) d^3x,$$

so erhalten wir für die *gesamte zeitliche Veränderung irgendeiner Feldobservablen*

$$\boxed{\dot{F} = \{H, F\} + \left(\frac{\partial F}{\partial t}\right)_{ex}}, \tag{99}$$

also dasselbe Gesetz wie in der Punktmechanik.

Setzen wir hierin insbesondere $F = \psi_i$ bzw. π_i, so haben wir die *Feldgleichungen* in POISSON-*Gestalt* vor uns

$$\dot{\psi}_i = \{H, \psi_i\}, \quad \dot{\pi}_i = \{H, \pi_i\}. \tag{100}$$

Aufg. 25: Man berechne für das SCHRÖDINGERsche Feld $\{h(\mathfrak{r}), \psi(\mathfrak{r}')\}$ und bestimme hieraus $\dot{\psi}$.

Aufg. 26: Man beweise für ein Feldfunktional F die Beziehung

$$\text{grad } F = -\{\mathfrak{P}, F\} + (\text{grad } F)_{ex} \tag{101}$$

Welche POISSON-Klammer-Relationen ergeben sich hieraus zwischen den Komponenten von Feldimpuls $\mathfrak{P}$ und Feldschwerpunkt $\mathfrak{R}$?

---

[1]) Die totale Zeitabhängigkeit des Funktionals F kommt einerseits durch die Zeitabhängigkeit der Funktionen $\psi_i(\mathfrak{r}, t)$ und $\pi_i(\mathfrak{r}, t)$, also vermöge der Lösung, und andererseits durch eine evtl. explizite Zeitabhängigkeit — bei festgehaltenen ψ_i und π_i — zustande. Entsprechendes gilt für die örtlichen Abhängigkeiten (vgl. Aufg. 26). Zum Beispiel wird das Funktional H [Gl. (83)] über ein Potential $V(\mathfrak{r}, t)$ eine explizite Funktion von $\mathfrak{r}$ und t.

ZWEITER TEIL

Der unitäre Vektorraum

Vorbemerkung

Die Kenntnis der gewöhnlichen Vektorrechnung samt der mit ihr verknüpften Transformationstheorie wollen wir als bekannt voraussetzen. Erweitert man die Konzeption eines Vektorraumes ins Komplexe, so gelangt man zum „*unitären*" Raum $\mathfrak{U}$. Er bietet das mathematische Rüstzeug, mit dem die Quantentheorie behandelt wird. Wie wir noch genauer sehen werden, machen es dabei die meisten physikalischen Probleme notwendig, einen unitären Raum mit unendlich vielen Dimensionen (HILBERT-Raum) zu verwenden.

Die mathematische Bedeutung des unitären Raumes liegt darin, daß sich viele Sätze aus der Theorie der Integraltransformationen (z. B. die der FOURIER-Transformation) in der einfachen, geometrischen Terminologie der Vektorrechnung formulieren lassen. Dieser Zusammenhang führt dazu, daß die Quantentheorie als eine in gewissem Maße „anschauliche" Geometrie und Dynamik in einem n- bzw. ∞-dimensionalen unitären Vektorraum $\mathfrak{U}_n$ bzw. $\mathfrak{U}_\infty$ interpretiert werden kann.[1]) Ein solcher Raum existiert natürlich nur abstrakt (d. h. „in Gedanken") und hat mit dem gewöhnlichen Ortsraum nichts gemein. Durch die Interpretation der im Ortsraum (Labor) stattfindenden quantenmechanischen Ereignisse im unitären Raum wird jedoch ein physikalischer Zusammenhang gestiftet, den wir im dritten Teil dieses Buches kennenlernen werden. Zunächst wollen wir uns jedoch mit dem rein mathematischen Kalkül der unitären Räume beschäftigen.

---

[1]) Um den engen Zusammenhang zwischen der Theorie des unitären Vektorraumes und der elementaren Vektor- und Tensorrechnung deutlich werden zu lassen, sollen im folgenden den wichtigsten Beziehungen des unitären Raumes Abbildungen zur Seite gestellt werden, in denen jene Aussagen geometrisch wiedergegeben sind, die verbleiben, wenn man die Beziehungen auf den *reellen* (zweidimensionalen) Raum spezialisiert. Damit diese Abbildungen die Begriffe des unitären Raumes und der darin formulierten Quantentheorie möglichst anschaulich machen, sind sie mit den Symbolen versehen, die im unitären Raum verwendet werden. *Man muß sich jedoch stets bewußt sein, daß in diesen anschaulichen Bildern wegen des Fehlens der komplexen Eigenschaften und der Beschränkung auf eine endliche Dimension nur ein Teil des tatsächlichen Sachverhalts erfaßt wird.*

Erstes Kapitel

Die Vektoren des unitären Raumes

§ 1. Linearität und Skalarprodukt

Die Vektoren des unitären Raumes bezeichnet man durch

$$|\varphi\rangle, |\chi\rangle, |\psi\rangle, \ldots, |\Phi\rangle, \ldots, |u\rangle, |v\rangle, \ldots .$$

Das von DIRAC eingeführte Symbol $|\,\rangle$ soll den Vektorcharakter der Größen zum Ausdruck bringen.[1]) Es hat also eine analoge Bedeutung wie die Frakturbuchstaben oder der Pfeil in der gewöhnlichen, dreidimensionalen, reellen Vektorrechnung.

Die Vektoren des unitären Raumes sollen die aus der gewöhnlichen Vektorrechnung bekannten *linearen Gesetze* erfüllen. Die aus zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ gebildete *Summe* $|\varphi\rangle + |\chi\rangle$ ist wieder ein Vektor, für den wir auch $|\varphi + \chi\rangle$ schreiben. Für die Vektoraddition sollen die Gesetze der

$$\text{Kommutativität} \quad |\varphi\rangle + |\chi\rangle = |\chi\rangle + |\varphi\rangle \tag{1}$$

und

$$\text{Assoziativität} \quad |\varphi\rangle + |\chi + \psi\rangle = |\varphi + \chi\rangle + |\psi\rangle \tag{2}$$

gelten. Das *Produkt* einer (komplexen) Zahl c mit einem Vektor $|\varphi\rangle$ ist wieder ein Vektor $c\,|\varphi\rangle = |c\varphi\rangle$, den wir im erweiterten Sinne „parallel" zu $|\varphi\rangle$ nennen wollen. Für diese Multiplikation soll das Distributivgesetz

$$c\,|\varphi + \chi\rangle = c\,|\varphi\rangle + c\,|\chi\rangle \tag{3}$$

erfüllt sein.

Je zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ ist als *Skalarprodukt* eine *komplexe Zahl* a zugeordnet. Dieses schreiben wir

$$\langle\varphi\,|\,\chi\rangle = a, \tag{4}$$

wobei aber jetzt — im Gegensatz zur reellen Vektorrechnung — *die Reihenfolge im Skalarprodukt wesentlich ist.*[2]) Vertauscht man nämlich die beiden Faktoren,

---

[1]) Die DIRACsche Bezeichnungsweise ist von der hier gewählten insofern etwas verschieden, als der Buchstabe, der innerhalb von $|\rangle$ steht, bei DIRAC der Eigenwert (Quantenzahl) ist, zu dem der Vektor als Eigenvektor gehört (vgl. 2.3 § 1). Während wir dafür $|u_\Lambda\rangle$ schreiben werden, steht nach DIRAC einfach $|\Lambda\rangle$.

[2]) Es ist z. T. üblich, das Zeichen $\langle\varphi|$ zu verselbständigen, indem man jedem Vektor $|\varphi\rangle$ einen „dualen" Vektor $\langle\varphi|$ zuordnet, der aber nicht im Raum der $|\varphi\rangle$ liegt, sondern in einem dualen Raum. Man nennt mit DIRAC $\langle\varphi|$ einen *bra-* und $|\varphi\rangle$ einen *ket*-Vektor, weil ihr Produkt die Skalarproduktklammer (bra-c-ket) ergibt. Man kann jedoch auf die Interpretation in einem dualen Raum verzichten und $\langle\varphi\,|\,\chi\rangle$ einfach als das Skalarprodukt der Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ lesen, in dem aber die Reihenfolge wesentlich ist.

so soll die zu a konjugierte komplexe Zahl a^* entstehen,

$$\langle \chi \mid \varphi \rangle = a^*, \tag{5}$$

d. h.

$$\boxed{\langle \chi \mid \varphi \rangle = \langle \varphi \mid \chi \rangle^*}. \tag{5a}$$

Das Skalarprodukt wird durch die folgenden Eigenschaften genauer definiert. Neben der Distributivität zur Addition

$$\langle \varphi \mid \chi + \psi \rangle = \langle \varphi \mid \chi \rangle + \langle \varphi \mid \psi \rangle \tag{6}$$

ist das Herausziehen einer komplexen Zahl aus einem Skalarprodukt wesentlich

$$\langle \varphi \mid c\chi \rangle = c \langle \varphi \mid \chi \rangle. \tag{7}$$

Steht die komplexe Zahl c jedoch beim ersten Faktor, so folgt aus Gl. (5) der bemerkenswerte Satz, daß diese *konjugiert-komplex* heraustritt,

$$\langle c\varphi \mid \chi \rangle = c^* \langle \varphi \mid \chi \rangle. \tag{8}$$

Aus Gl. (5a) ergibt sich ferner, daß das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst reell sein muß. Wir wollen darüber hinausgehend fordern, daß dieses Skalarprodukt stets *positiv* sein soll,

$$\langle \varphi \mid \varphi \rangle \geqq 0, \tag{9}$$

wobei das Gleichheitszeichen nur gelte, falls $|\varphi\rangle = 0$[1]) ist. Damit ist es möglich, die Länge oder Norm eines Vektors zu definieren,

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi \mid \varphi \rangle}. \tag{10}$$

In Analogie zur reellen Vektorrechnung nennen wir zwei Vektoren *orthogonal* zueinander, wenn ihr Skalarprodukt verschwindet (ohne daß einer der beiden Vektoren Null zu sein braucht):

$$\boxed{\langle \varphi \mid \chi \rangle = 0, \quad |\varphi\rangle \text{ und } |\chi\rangle \text{ sind orthogonal}}. \tag{11}$$

Aufg. 27: Was ergibt sich für das Skalarprodukt zweier paralleler Einheitsvektoren eines unitären Raumes?

§ 2. Basisvektoren

Um die Komponenten eines Vektors bezüglich eines Systems von *Basisvektoren* angeben zu können, müssen wir zunächst festlegen, wieviel linear unabhängige Vektoren — die wir dann als Basisvektoren benützen können — der unitäre Vektorraum $\mathfrak{U}$ haben soll. Diese Anzahl n der linear unabhängigen Vektoren, d. h. die „*Dimension*" des Raumes $\mathfrak{U}_n$, ist so zu wählen, wie es das

[1]) Wir bezeichnen den Nullvektor, definiert durch $|\varphi\rangle + 0 = |\varphi\rangle$, durch eine einfache Null.

physikalische Problem erfordert, das in diesem Raum quantenmechanisch beschrieben werden soll. Wir werden sehen, daß etwa zur Darstellung eines Spins s ein $(2s + 1)$-dimensionaler unitärer Vektorraum $\mathfrak{U}_{2s+1}$ notwendig ist. Für die quantenmechanische Behandlung der Bewegung eines Teilchens kommt man hingegen nicht mehr mit einem endlich-dimensionalen $\mathfrak{U}$ aus. Es ist vielmehr ein *unendlich*-dimensionaler, unitärer Vektorraum $\mathfrak{U}_\infty$ nötig, was also heißt, daß es unendlich viele, linear unabhängige Vektoren in diesem Raum gibt. Ein solcher Übergang zu unendlich vielen Dimensionen birgt natürlich eine Fülle mathematischer Probleme in sich, auf die aber hier nicht näher eingegangen werden soll. Für die Quantentheorie ist als $\mathfrak{U}_\infty$ der sog. HILBERT-Raum $\mathfrak{H}$ von Bedeutung, dessen Dimension *„abzählbar" unendlich* ist, was bedeutet, daß die unabhängigen Vektoren aus $\mathfrak{H}$ durch die natürlichen Zahlen numeriert werden können.

Darüber hinaus wird der HILBERT-Raum durch zwei weitere Forderungen charakterisiert:

a) $\mathfrak{H}$ ist *„vollständig"*, d. h., gilt für eine Folge von Vektoren $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots$ das CAUCHYsche Konvergenzkriterium (d. h. $\|\varphi_m - \varphi_n\| < \varepsilon$ für $m, n > N$), so existiert ein Grenzvektor $|\varphi\rangle$, der wieder ein HILBERT-Raum-Vektor ist.

b) $\mathfrak{H}$ ist *„separabel"*, d. h., für jedes Element $|\varphi\rangle$ aus $\mathfrak{H}$ gibt es eine Folge mit $|\varphi\rangle$ als Grenzvektor.

Die Zerlegung eines Vektors $|\varphi\rangle$ nach linear unabhängigen *Basisvektoren* $|v_k\rangle$ ist also in einem endlich-dimensionalen $\mathfrak{U}_n$ eine endliche Summe und im HILBERT-Raum $\mathfrak{H}$ eine unendliche Summe

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle\, \varphi_k. \tag{12}$$

Die *Komponenten* φ_k des Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich der Basis $|v_k\rangle$ sind dabei (komplexe) Zahlen, die durch den Index k numeriert werden.[1])

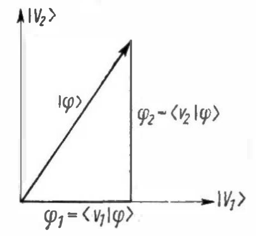


Fig. 26. Ein Vektor $|\varphi\rangle$ und seine Komponenten $\varphi_k = \langle v_k | \varphi\rangle$ im Reellen

Wie bei gewöhnlichen Vektoren wird das Rechnen besonders einfach, wenn wir orthogonale und normierte, kurz *„orthonormierte"*, Basisvektoren zugrunde legen (Fig. 26). Die Orthogonalität bedeutet nach Gl. (11), daß $\langle v_k | v_{k'}\rangle = 0$ ist für $k \neq k'$. Die Normierung der Basisvektoren soll auf die Länge eins erfolgen. Die Orthonormierung besagt also

$$\langle v_k | v_{k'}\rangle = \delta_{kk'}. \tag{13}$$

Damit ist es möglich, die Gl. (12) nach den Komponenten φ_k aufzulösen. Multiplizieren wir nämlich mit irgendeinem Basisvektor $|v_{k'}\rangle$ skalar

$$\langle v_{k'} | \varphi\rangle = \sum_k \langle v_{k'} | v_k\rangle\, \varphi_k,$$

[1]) Mehrfache Summen können durch geeignete Wahl des Summationsindex ebenfalls in diese Form gebracht werden.

so läßt sich die Summe über k wegen (13) sofort ausführen, und wir erhalten (wenn wir den Strich weglassen) für die Komponenten

$$\varphi_k = \langle v_k \mid \varphi \rangle . \tag{14}$$

Setzt man dieses Ergebnis in Gl. (12) ein, so ergibt sich die Identität

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle \langle v_k \mid \varphi \rangle . \tag{15}$$

Man bezeichnet ein System von Basisvektoren $|v_k\rangle$ als ein *vollständiges, normiertes Orthogonalsystem*, wenn sich *jeder* Vektor $|\varphi\rangle$ des betrachteten unitären Raumes durch Gl. (12) bzw. (15) darstellen läßt.

Den Begriff der *Vollständigkeit* macht man sich am besten folgendermaßen klar: Läßt man aus einem vollständigen System von Basisvektoren einige weg, so erhält man ein unvollständiges System — das im Fall des HILBERT-Raumes natürlich ebenfalls noch aus unendlich vielen Vektoren bestehen kann —, weil eben ein Vektor, der Komponenten in Richtung der weggelassenen Basisvektoren besitzt, nicht völlig in dem verkürzten System dargestellt werden kann. Zum Beispiel bilden in einem dreidimensionalen Vektorraum zwei Vektoren kein vollständiges System.

Der spezielle unitäre Raum, der für die quantentheoretische Beschreibung eines bestimmten physikalischen Systems notwendig ist, wird — wie wir noch sehen werden (Kap. 3.4) — durch die spezielle Art dieses Systems, genauer gesprochen, durch die Relationen zwischen seinen Observablen festgelegt. Diese Relationen bestimmen nämlich Vektoren — die „Eigenvektoren" eines Operators (2.3 § 1) —, die den für das betreffende physikalische Problem notwendigen unitären Raum per definitionem aufspannen. Die Vollständigkeit eines Basissystems wird damit also zu einem physikalischen Problem. In den mathematischen Überlegungen dieses Teils des Buches wollen wir jedoch hierauf nicht näher eingehen und an einen durch einen vollständigen Satz von Basisvektoren vorgegebenen unitären Raum denken.

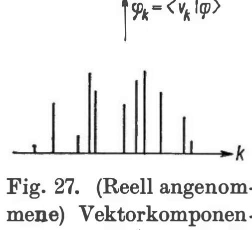


Fig. 27. (Reell angenommene) Vektorkomponenten $\varphi_k = \langle v_k \mid \varphi \rangle$ bei diskreten k-Werten

Während in den bisherigen Überlegungen der Index k die verschiedenen Basisvektoren in willkürlicher Weise numerierte, erfolgt bei ihrer Festlegung durch ein Eigenwertproblem die Numerierung durch die Eigenwerte (oder durch eine Funktion dieser). Der Index k erhält damit die Bedeutung einer physikalischen Größe (3.3 § 4), deren Werte längs einer k-Achse (oder allgemeiner in einem k-Raum) aufgetragen werden können. Die durch das Eigenwertproblem definierten (reellen!) k-Werte können diskret (i. a. nichtäquidistant) und auch kontinuierlich liegen (Fig. 27 und 28).

§ 3. Diracsche Vektoren

Wenn k kontinuierliche Werte annimmt, werden die Komponenten eines Vektors $|\varphi\rangle$ zu einer (i. allg. *komplexwertigen*) *Funktion* $\varphi(k)$ *der* (*reellen*) *kon-*

tinuierlichen Variablen k. Dabei ist zu erwarten, daß in Gl. (12) die Summe zu einem Integral über k wird. Das System der Basisvektoren ist dann aber nicht mehr abzählbar unendlich, im Gegensatz zu dem Axiom des HILBERT-Raumes. Die mathematisch saubere Bewältigung dieser Schwierigkeit im Rahmen der Theorie des HILBERT-Raumes erfordert Methoden, die über den Rahmen dieses Buches hinausgehen. Für die physikalischen Bedürfnisse hat sich eine wesentlich einfachere Methode, die auf DIRAC zurückgeht, als zweckmäßig erwiesen, bei der die Axiome des HILBERT-Raumes etwas durchbrochen werden. Es sei jedoch bereits hier betont, daß alle letzten Endes physikalisch realisierbaren Ergebnisse stets wieder im HILBERT-Raum zu interpretieren sind, weil bei der physikalischen Messung primär eigentlich immer Zahlenfolgen vorliegen, die erst durch Interpolation zu einer glatten Funktion werden.

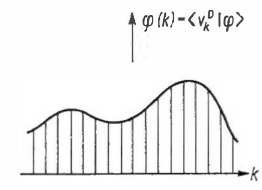


Fig. 28. (Reell angenommene) Funktion $\varphi(k) = \langle v_k^D \mid \varphi \rangle$ der kontinuierlichen Variablen k

Die Herleitung des FOURIER-Integrals aus der FOURIER-Reihe ist ein Beispiel für den Grenzübergang von einer Zahlenfolge φ_k zu einer kontinuierlichen Funktion $\varphi(k)$. Um allgemein solche Grenzübergänge im Kalkül des unitären Raumes zu formulieren, gehen wir von einem diskreten Satz orthonormierter HILBERT-Raum-Vektoren $|v_{k,\Delta k}\rangle$ aus, wobei Δk den Abstand benachbarter k-Werte angibt. Für den Übergang zu kontinuierlichem k bilden wir im Skalarprodukt mit einem beliebigen, festen HILBERT-Raum-Vektor $|\varphi\rangle$ den Grenzwert[1] [2]

$$\lim_{\Delta k \to 0} \frac{\langle v_{k,\Delta k} \mid \varphi \rangle}{\sqrt{\Delta k}} = \varphi(k). \tag{16}$$

Den sich so ergebenden, komplexen Zahlenwert $\varphi(k)$ wollen wir als Skalarprodukt zwischen $|\varphi\rangle$ und einem *formalen* Vektor $|v_k^D\rangle$ auffassen, den wir einen DIRACschen Vektor nennen,

$$\varphi(k) = \langle v_k^D \mid \varphi \rangle. \tag{17}$$

In einprägsamerer Kurzform schreiben wir dafür

$$\boxed{|v_k^D\rangle = \lim_{\Delta k \to 0} \frac{|v_{k,\Delta k}\rangle}{\sqrt{\Delta k}}}. \tag{18}$$

[1]) In der Interpretation von k als Eigenwert eines Operators muß man sich für den Grenzübergang $\Delta k \to 0$ diesen Operator in Abhängigkeit eines Parameters denken, bei dessen Veränderung die Eigenwerte dann immer dichter werden.

[2]) Diese Grenzwertbildung ist ähnlich dem Übergang von einer diskreten Massenverteilung zu einer kontinuierlichen Dichte $\varrho = \Delta M/\Delta x$. Die im Gegensatz dazu in Gl. (16) stehende Wurzel wird durch das doppelte Auftreten der Basisvektoren in Gl. (15) bedingt. Mit dieser Definition des Grenzwertes wird dann die Summe über k zu einem Integral [Gl. (20)].

Mit Hilfe dieser Definition ist man imstande, von der Komponentendarstellung (15) eines HILBERT-Raum-Vektors $|\varphi\rangle$ zu einer Zerlegung nach den DIRACschen Vektoren überzugehen

$$|\varphi\rangle = \lim_{\Delta k\to 0} \sum_k |v_{k,\Delta k}\rangle \langle v_{k,\Delta k} | \varphi\rangle = \lim_{\Delta k\to 0} \sum_k |v_k^D\rangle \langle v_k^D | \varphi\rangle \Delta k, \tag{19}$$

wofür man ein *Integral* über k schreiben kann[1])

$$|\varphi\rangle = \int_k |v_k^D\rangle \langle v_k^D | \varphi\rangle \,\mathrm{d}k = \int_k |v_k^D\rangle \varphi(k)\,\mathrm{d}k. \tag{20}$$

Multipliziert man diese Gleichung skalar mit $|v_{k'}^D\rangle$[2])

$$\langle v_{k'}^D | \varphi\rangle = \int_k \langle v_{k'}^D | v_k^D\rangle \langle v_k^D | \varphi\rangle \,\mathrm{d}k, \tag{21}$$

so ergibt sich nach Gl. (5.1–13), daß für die DIRACschen Basisvektoren die *Orthonormierungsbedingung* lautet

$$\langle v_k^D | v_{k'}^D\rangle = \delta(k - k') \tag{23}$$

(*„Normierung auf δ-Funktion"*). *Die Länge der DIRACschen Vektoren ist unendlich, aber Vektoren mit infinitesimal benachbarten Indizes stehen bereits aufeinander senkrecht. Die DIRACschen Vektoren sind daher keine echten Elemente des HILBERT-Raumes. Sie sind jedoch äußerst zweckmäßig, da ihre Skalarprodukte mit einem Vektor $|\varphi\rangle$ die (komplexen) Werte einer Funktion $\varphi(k)$ der kontinuierlichen Variablen k darstellen* (Fig. 28). Durch die gegebene Herleitung wird klar, daß die $|v_k^D\rangle$ *lediglich ein formales Mittel sind, um das dauernde Anschreiben von Grenzwerten zu vermeiden.* Sie erlauben eine einfache und einheitliche Darstellung der Quantenmechanik.

Wendet man im besonderen die Entwicklung (20) auf den Vektor $|v_{k,\Delta k}\rangle$ an,

$$|v_{k,\Delta k}\rangle = \int_k^{k+\Delta k} |v_{k'}^D\rangle \langle v_{k'}^D | v_{k,\Delta k}\rangle \,\mathrm{d}k',$$

so genügt es dabei wegen der Orthogonalität die Integration nur über das Intervall Δk zu führen. Aus Gl. (18) folgt in der Grenze $\langle v_{k'}^D | v_{k,\Delta k}\rangle = (\Delta k)^{-1/2}$, so daß man die häufig verwendete Darstellung

$$|v_{k,\Delta k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} \int_k^{k+\Delta k} |v_{k'}^D\rangle \,\mathrm{d}k' \tag{24}$$

---

[1]) Der Leser stoße sich nicht daran, daß die Integrationsvariable k in $|v_k^D\rangle$ als Index steht.

[2]) Gl. (20) gilt zunächst nur für das Skalarprodukt $\langle\chi|\varphi\rangle$ mit irgendeinem HILBERT-Raum-Vektor $|\chi\rangle$. Setzen wir $|\chi\rangle = (\Delta k')^{-1/2}|v_{k',\Delta k'}\rangle$, so wird in der Grenze $\Delta k' \to 0$

$$\langle v_{k'}^D|\varphi\rangle = \lim_{\Delta k'\to 0} \int_k \frac{\langle v_{k',\Delta k'}|v_k^D\rangle \langle v_k^D|\varphi\rangle}{\sqrt{\Delta k'}} \,\mathrm{d}k. \tag{22}$$

Dieser Limes ist auf der rechten Seite von Gl. (21) gemeint. Die formale Vertauschung von Grenzwert und Integration liegt ganz im Rahmen der Definition der δ-„Funktion", (5.1 § 1).

erhält, die natürlich bei Ausführung der Integration über das kleine Intervall Δk wieder mit (18) identisch ist. Bei vorgegebenen $|v_{k'}^D\rangle$ — z. B. gewonnen aus einem Eigenwertproblem mit kontinuierlichen Eigenwerten k' — erhält man durch Integration über ein Intervall Δk nach Gl. (24) einen echten HILBERT-Raum-Vektor (vgl. Aufg. 49).

Verwendet man statt der Veränderlichen k eine andere Variable $\varkappa$, die eine differenzierbare, monotone Funktion $\varkappa = \varkappa(k)$ ist, so muß wegen Gl. (18) der Zusammenhang

$$|v_\varkappa^D\rangle \sqrt{\mathrm{d}\varkappa} = |v_k^D\rangle \sqrt{\mathrm{d}k}, \tag{25}$$

d. h.

$$|v_\varkappa^D\rangle = \frac{|v_k^D\rangle}{\sqrt{d\varkappa/dk}} \tag{25'}$$

bestehen. In Gl. (20) tritt damit an Stelle des Integrals über k eines über $\varkappa$.

Alle vorstehenden Überlegungen lassen sich in analoger Weise auch für *Funktionen mehrerer Veränderlicher* $\varphi(k_1, k_2, \ldots)$ formulieren (vgl. auch Kap. 2.4). Anstatt des einen Integrals über k treten dann mehrfache Integrale. In Gl. (25') steht an Stelle von $\mathrm{d}\varkappa/\mathrm{d}k$ die entsprechende Funktionaldeterminante.

§ 4. Zusammenfassung in einheitlicher Schreibweise

Neben den bisher besprochenen Fällen, in denen ein Vektor $|\varphi\rangle$ eines unitären Vektorraumes entweder durch eine (endliche oder unendliche) Summe

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle \varphi_k$$

oder durch ein Integral

$$|\varphi\rangle = \int_k |v_k^D\rangle \varphi(k)\,\mathrm{d}k$$

dargestellt wurde, ist es in der Physik häufig auch nötig, eine Zerlegung vorzunehmen, in der sowohl eine Summe als auch ein Integral auftritt,

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle \varphi_k + \int_k |v_k^D\rangle \varphi(k)\,\mathrm{d}k. \tag{26}$$

Um nun im Rahmen allgemeiner Überlegungen nicht dauernd diese Fallunterscheidungen machen zu müssen, vereinen wir diese Gleichungen in der Schreibweise

$$\boxed{|\varphi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \varphi(k)\,\mathrm{d}k}\,. \tag{27}$$

Dabei soll also über k integriert werden, sofern k kontinuierlich ist — der Index D wird jetzt unterdrückt —, und summiert, soweit k diskret ist. *Aus* $\varphi(k)\,\mathrm{d}k$ *werden die Komponenten* φ_k. Schließlich soll in Gl. (27) das eine Integral-Summenzeichen auch repräsentativ für Integrale oder Summen über mehrere $k_1, k_2, \ldots$ sein.

Wenn wir das KRONECKER-Symbol $\delta_{kk'}$ und die DIRACsche δ-Funktion $\delta(k - k')$ in dem gemeinsamen Symbol $\delta(k, k')$ vereinen, können wir die *Orthonormierung* der HILBERT-Raum-Basisvektoren [Gl. (13)] und jene der DIRAC-Vektoren [Gl. (23)] zusammenfassen zu

$$\boxed{\langle v_k \mid v_{k'} \rangle = \delta(k, k')} \,. \tag{28}$$

Da die *Komponenten* $\varphi(k)$ des Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich der $|v_k\rangle$ — im Kontinuum gedeutet als *Funktionswerte* — die Skalarprodukte

$$\boxed{\varphi(k) = \langle v_k \mid \varphi \rangle} \tag{29}$$

sind [entsprechend Gl. (14) und (17)], wird aus Gl. (27) die Identität

$$\boxed{|\varphi\rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \langle v_k \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k} \,, \tag{30}$$

eine Zusammenfassung der Gl. (15) und (20).

Verändert man die Basisvektoren um Phasenfaktoren

$$|v_k\rangle \to |v_k'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_k} |v_k\rangle,$$

so ist $|v_k'\rangle \langle v_k'| = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_k} |v_k\rangle \langle v_k| \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_k} = |v_k\rangle \langle v_k|$ dagegen invariant. Es gilt also

$$|\varphi\rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \langle v_k \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k'\rangle \langle v_k' \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k.$$

Ein *anderer* Vektor $|\varphi'\rangle$ entsteht jedoch, wenn man

$$|\varphi'\rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \langle v_k' \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_k} \langle v_k \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k$$

bildet. Zum Beispiel ist

$$|v_1\rangle \varphi_1 + |v_2\rangle \varphi_2 \neq |v_1\rangle \varphi_1 - |v_2\rangle \varphi_2.$$

§ 5. Skalarprodukt in Komponentenform

Sind zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ in Komponenten bezüglich einer Basis $|v_k\rangle$ gegeben

$$|\varphi\rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \varphi(k) \, \mathrm{d}k \quad \text{und} \quad |\chi\rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_{k'} |v_{k'}\rangle \chi(k') \, \mathrm{d}k',$$

so läßt sich ihr Skalarprodukt

$$\langle \varphi \mid \chi \rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_{k'} \langle v_k \mid v_{k'}\rangle \varphi^*(k) \, \chi(k') \, \mathrm{d}k \, \mathrm{d}k'$$

wegen Gl. (28) vereinfachen zu

$$\boxed{\langle \varphi \mid \chi \rangle = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k \varphi^*(k) \, \chi(k) \, \mathrm{d}k = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_k \langle \varphi \mid v_k\rangle \langle v_k \mid \chi \rangle \, \mathrm{d}k} \,. \tag{31}$$

Aus dieser Beziehung kann man also die Zahl $\langle\varphi \mid \chi\rangle$ berechnen, wenn die Komponenten bzw. Funktionen $\varphi(k)$ und $\chi(k)$ gegeben sind.

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst

$$\langle\varphi \mid \varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |\varphi(k)|^2 \,\mathrm{d}k \tag{32}$$

ist entsprechend Gl. (9) stets positiv. Für Vektoren $|\varphi\rangle$ aus $\mathfrak{H}$ ist dieser Ausdruck endlich, die Funktion $\varphi(k)$ ist *„quadratintegrabel"*.

Aufg. 28: Man berechne die Länge und das Skalarprodukt $\langle\varphi \mid \chi\rangle$ der Vektoren

a) $|\varphi\rangle = \dfrac{|v_1\rangle + \mathrm{i}\,|v_2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\chi\rangle = \dfrac{|v_1\rangle - \mathrm{i}\,|v_2\rangle}{\sqrt{2}},$

b) $|\varphi\rangle = \int\limits_a^b |v_k\rangle\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\, \mathrm{d}k, \quad |\chi\rangle = \int\limits_a^b |v_k\rangle\, \mathrm{e}^{2\mathrm{i}k}\, \mathrm{d}k.$

§ 6. Unitäre Basistransformationen

Ein wesentliches Charakteristikum für einen Vektor ist *die Transformation seiner Komponenten bei einem Wechsel der Basisvektoren.* Um dieses Verhalten im unitären Raum kennenzulernen, stellen wir das neue System von Basisvektoren $|u_x\rangle$, das wieder ein vollständiges, normiertes Orthogonalsystem sein soll, in der alten Basis $|v_k\rangle$ dar,

$$|u_x\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |v_k\rangle\, u_x(k)\, \mathrm{d}k. \tag{33}$$

Die *Transformations-„Matrix"* $u_x(k) \equiv u(k,x)$, die im Kontinuierlichen eine (komplexe) Funktion der beiden (reellen) Veränderlichen k und x ist, besteht also aus den Komponenten der neuen Basisvektoren bezüglich der alten Basis (Fig. 29),

$$u_x(k) = u(k, x) = \langle v_k \mid u_x\rangle. \tag{34}$$

Fig. 29. Drehung als reelles Analogon zum unitären Basiswechsel

Die Forderung, daß die neuen Basisvektoren $|u_x\rangle$ wieder orthonormiert sein sollen,

$$\boxed{\langle u_{x'} \mid u_x\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k u^*(k, x')\, u(k, x)\, \mathrm{d}k = \delta(x', x)}\,, \tag{35}$$

liefert die sogenannten *Unitaritätsbedingungen* für die Funktion $u(k, x)$. Es handelt sich um die Erweiterung der Orthogonalitätsbedingungen auf das Komplexe.

Zerlegt man umgekehrt die Vektoren $|v_k\rangle$ bezüglich der Basis $|u_x\rangle$

$$|v_k\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_x |u_x\rangle\, v_k(x)\, \mathrm{d}x \quad \text{mit} \quad v_k(x) \equiv v(x, k) = \langle u_x \mid v_k\rangle, \tag{36}$$

so folgen für $v(x, k)$ die Beziehungen

$$v(x, k) = u^*(k, x) \tag{37}$$

und
$$\langle v_{k'} \mid v_k \rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_x v^*(x, k')\, v(x, k)\, \mathrm{d}x = \delta(k', k). \tag{38}$$

Aus der Komponentendarstellung eines beliebigen Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich zweier Basissysteme $|v_k\rangle$ bzw. $|u_x\rangle$ (Fig. 30),
$$|\varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |v_k\rangle\, \varphi(k)\, \mathrm{d}k = \sum\!\!\!\!\!\!\int_x |u_x\rangle\, f(x)\, \mathrm{d}x, \tag{39}$$
wobei
$$\varphi(k) = \langle v_k \mid \varphi\rangle \quad \text{und} \quad f(x) = \langle u_x \mid \varphi \rangle \tag{40}$$

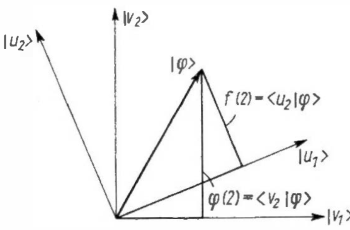


Fig. 30. Die Komponenten eines Vektors $|\varphi\rangle$ in den Basissystemen $|v_k\rangle$ und $|u_x\rangle$ (reelles Abbild)

ist, erhält man sofort die *Transformation zwischen den Komponenten* $\varphi(k)$ *und den Komponenten* $f(x)$, indem man entweder mit $\langle u_x|$ oder mit $\langle v_k|$ multipliziert

$$\boxed{\begin{aligned} f(x) &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_k v(x, k)\, \varphi(k)\, \mathrm{d}k \\ \varphi(k) &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_x v^*(x, k)\, f(x)\, \mathrm{d}x \end{aligned}}\,. \tag{41}$$

Die erste dieser Transformationsgleichungen bedeutet, daß eine Funktion $f(x)$ nach einem vollständigen Orthogonalsystem von Funktionen $v(x, k)$ entwickelt wird, wobei sich bei gegebenem $f(x)$ die zugehörigen „Entwicklungskoeffizienten" $\varphi(k)$ aus der zweiten Zeile berechnen.

Ein *Beispiel* einer solchen Entwicklung ist aus der Theorie der FOURIER-Reihen bzw. des FOURIER-Integrals wohl bekannt: Die FOURIER-Transformation wird durch die Transformationsmatrix
$$v(x, k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{42}$$
bestimmt.

FOURIER-Reihe: $0 \leqq x \leqq 2\pi,\ k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

$$(39) \rightarrow \quad |\varphi\rangle = \int_0^{2\pi} |u_x\rangle\, f(x)\, \mathrm{d}x = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} |v_k\rangle\, \varphi_k,$$

$$(41) \rightarrow \quad \begin{cases} f(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \varphi_k, \\ \varphi_k = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, f(x)\, dx, \end{cases}$$

$$(38) \rightarrow \quad \langle v_{k'} \mid v_k \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k')x}\, \mathrm{d}x = \delta_{k'k},$$

$$(35) \rightarrow \quad \langle u_{x'} \mid u_x \rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x'-x)} = \delta(x' - x).$$

FOURIER-Integral: $-\infty < x < +\infty,\ -\infty < k < +\infty$.

$$(39) \rightarrow \qquad |\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_x\rangle\, f(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |v_k\rangle\, \varphi(k)\, \mathrm{d}k,$$

$$(41) \rightarrow \qquad \begin{cases} f(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \varphi(k)\, \mathrm{d}k, \\ \varphi(k) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, f(x)\, \mathrm{d}x, \end{cases}$$

$$(38) \rightarrow \qquad \langle v_{k'} \,|\, v_k\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k')x}\, \mathrm{d}x = \delta(k'-k),$$

$$(35) \rightarrow \qquad \langle u_{x'} \,|\, u_x\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x'-x)}\, \mathrm{d}k = \delta(x'-x).$$

Je nach der physikalischen Problemstellung sind jedoch auch häufig Entwicklungen nach anderen vollständigen Orthogonalsystemen notwendig; man kann z. B. eine Funktion $f(\vartheta, \varphi)$ auf der Einheitskugel nach *Kugelflächenfunktionen* $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$ (vgl. 4.3 § 2) entwickeln ($x \rightarrow \vartheta, \varphi;\ k \rightarrow l, m$):

$$\left.\begin{aligned} f(\vartheta, \varphi) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^{-l} Y_l^m(\vartheta, \varphi)\, \varphi_l^m, \\ \varphi_l^m &= \int_{\substack{\text{Kugel-}\\ \text{oberfläche}}} Y_l^{m*}(\vartheta, \varphi)\, f(\vartheta, \varphi)\, \mathrm{d}\Omega \end{aligned}\right\} \qquad (43)$$

($\mathrm{d}\Omega$ = räumlicher Winkel $\widehat{=}$ $\sin\vartheta\, \mathrm{d}\vartheta\, \mathrm{d}\varphi$).

Die Bedeutung der entwickelten Theorie des unitären Vektorraums unendlich vieler Dimensionen liegt nun gerade darin, daß *die vermöge einer Entwicklung* (41) *zusammengehörigen Funktionen* $f(x)$ *und* $\varphi(k)$ *als Komponenten e i n e s abstrakten Vektors* $|\varphi\rangle$ *bezüglich verschiedener Basisvektoren interpretiert werden* [Gl. (39)]. Künftig bezeichnen wir die Komponenten $f(x)$ und $\varphi(k)$ desselben Vektors $|\varphi\rangle$ mit $\varphi(x)$ und $\varphi(k)$, obwohl es sich natürlich um verschiedene Funktionen handelt.

Zweites Kapitel

Lineare Operatoren

§ 1. Definition und Eigenschaften linearer Operatoren

Erweitert man die Definition der Tensoren auf das Komplexe, und läßt man außerdem wieder unendlich viele Dimensionen des unitären Raums zu, so gelangt man zu dem für die Quantentheorie so wichtigen Begriff des *Operators:* Wird ein Vektor $|\varphi\rangle$ auf einen anderen Vektor $|\chi\rangle$ abgebildet (Fig. 31), so be-

schreiben wir diese Vektorzuordnung durch einen Operator $\mathscr{L}$ [1])

$$\boxed{|\varphi\rangle \xrightarrow{\mathscr{L}} |\chi\rangle = \mathscr{L}\,|\varphi\rangle} \,. \tag{1}$$

Für den neuen Vektor schreiben wir statt $|\chi\rangle$ auch $|\mathscr{L}\,\varphi\rangle$.

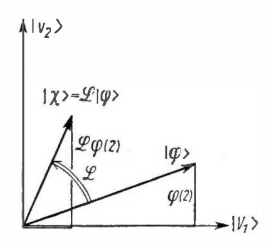


Fig. 31. Reelle Darstellung der Vektorzuordnung durch einen Operator $\mathscr{L}$

Projizieren wir die Vektorzuordnung (1) auf eine Basis $|v_k\rangle$, so hat der Vektor $|\chi\rangle$ die Komponenten $\langle v_k \mid \chi\rangle = \langle v_k \mid \mathscr{L}\,\varphi\rangle$. Durch den Operator $\mathscr{L}$ wird also der Funktion $\varphi(k) = \langle v_k \mid \varphi\rangle$ die Funktion $\chi(k) = \langle v_k \mid \chi\rangle$ zugeordnet,

$$\boxed{\varphi(k) \xrightarrow{\mathscr{L}} \chi(k) = \mathscr{L}\,\varphi(k)} \,. \tag{2}$$

Das Symbol $\mathscr{L}\,\varphi$ bedeutet also lediglich *eine andere Schreibweise für das Funktionszeichen* χ.

Werden die Vektoren insbesondere in sich übergeführt, so stellen wir diese triviale Vektorzuordnung durch den *Einheitsoperator* $\mathscr{I}$ dar. Die Abbildung auf den Nullvektor erfolgt durch den *Nulloperator* $\mathscr{O}$.

Es ist nicht notwendig, daß die Wirkung von $\mathscr{L}$ für alle Vektoren $|\varphi\rangle$ des HILBERT-Raumes definiert ist. Jene Vektoren $|\varphi\rangle$, für die die Anwendung von $\mathscr{L}$ erklärt ist, bilden den sogenannten *Definitionsbereich* von $\mathscr{L}$, und die Gesamtheit der sich ergebenden Vektoren $|\mathscr{L}\,\varphi\rangle$ nennt man den *Wertevorrat* von $\mathscr{L}$. [2])

Die betrachteten Operatoren sollen im folgenden dadurch eingeschränkt sein, daß durch sie eine *lineare* Vektorzuordnung vermittelt wird, d. h., es soll gelten

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{L}\,|\varphi_1 + \varphi_2\rangle &= \mathscr{L}\,|\varphi_1\rangle + \mathscr{L}\,|\varphi_2\rangle \\ \text{und} \qquad \mathscr{L}\,|a\varphi\rangle &= a\,\mathscr{L}\,|\varphi\rangle \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

(a beliebige komplexe Zahl).

Unter der *Summe* $\mathscr{L} + \mathscr{M}$ zweier Operatoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ versteht man einen Operator, für den gilt (Fig. 32)

$$(\mathscr{L} + \mathscr{M})\,|\varphi\rangle = \mathscr{L}\,|\varphi\rangle + \mathscr{M}\,|\varphi\rangle . \tag{4}$$

Unter dem *Produkt* $\mathscr{L}\mathscr{M}$ soll ein Operator verstanden werden, der dasselbe bewirkt, wie wenn man zuerst $\mathscr{M}\,|\varphi\rangle = |\mathscr{M}\,\varphi\rangle$ bildet und dann auf diesen

[1]) Operatoren bezeichnen wir durchweg mit Skriptbuchstaben.

[2]) Wenn der Definitionsbereich eines Operators nicht der gesamte HILBERT-Raum ist, sind — insbesondere bei der Lösung des Eigenwertproblems (Kap. 2.3) — detailliertere mathematische Untersuchungen notwendig, als wir hier in dieser Einführung in die Quantentheorie bringen wollen. Der Leser sei in dieser Hinsicht auf Lehrbücher der Funktionalanalysis verwiesen.

Vektor den Operator $\mathscr{L}$ anwendet (Fig. 33)

$$\mathscr{L}\,\mathscr{M}\,|\varphi\rangle = \mathscr{L}\,|\,\mathscr{M}\,\varphi\rangle = |\,\mathscr{L}\,\mathscr{M}\,\varphi\rangle. \tag{5}$$

Die Wirkung von $\mathscr{L}\,\mathscr{M}$ muß aber nicht mit jener von $\mathscr{M}\,\mathscr{L}$ übereinstimmen.

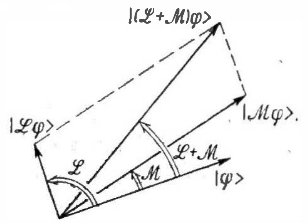


Fig. 32. Summe zweier Operatoren

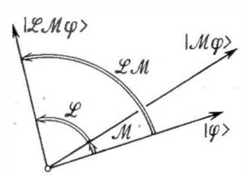


Fig. 33. Produkt zweier Operatoren

Die Operatordifferenz $\mathscr{M}\,\mathscr{L} - \mathscr{L}\,\mathscr{M}$, die man abkürzend

$$\boxed{\mathscr{M}\,\mathscr{L} - \mathscr{L}\,\mathscr{M} = [\mathscr{M}, \mathscr{L}]_- \text{ oder einfach } [\mathscr{M}, \mathscr{L}]} \tag{6}$$

schreibt, bezeichnet man als *Kommutator* zwischen $\mathscr{M}$ und $\mathscr{L}$. Verschwindet der Kommutator, so ist $\mathscr{M}\,\mathscr{L} = \mathscr{L}\,\mathscr{M}$, und man nennt die beiden Operatoren miteinander *vertauschbar*[1]). Als unmittelbare Folge der Definition des Kommutators gelten folgende Rechenregeln:

$$[\mathscr{L}, \mathscr{M}] = -[\mathscr{M}, \mathscr{L}] \tag{7_1}$$

$$[\mathscr{L}, \mathscr{L}] = \mathscr{O} \tag{7_2}$$

$$[\mathscr{L}, a\,\mathscr{M}] = a\,[\mathscr{L}, \mathscr{M}] \tag{7_3}$$

$$[\mathscr{L}, a\,\mathscr{I}] = \mathscr{O} \tag{7_4}$$

$$[\mathscr{L}_1 + \mathscr{L}_2, \mathscr{M}] = [\mathscr{L}_1, \mathscr{M}] + [\mathscr{L}_2, \mathscr{M}] \tag{7_5}$$

$$[\mathscr{L}_1\,\mathscr{L}_2, \mathscr{M}] = [\mathscr{L}_1, \mathscr{M}]\,\mathscr{L}_2 + \mathscr{L}_1[\mathscr{L}_2, \mathscr{M}] \tag{7_6}$$

$$[\mathscr{M}, \mathscr{L}_1\,\mathscr{L}_2] = [\mathscr{M}, \mathscr{L}_1]\,\mathscr{L}_2 + \mathscr{L}_1[\mathscr{M}, \mathscr{L}_2] \tag{7_7}$$

$$[\mathscr{L}_1, [\mathscr{L}_2, \mathscr{L}_3]] + [\mathscr{L}_2, [\mathscr{L}_3, \mathscr{L}_1]] + [\mathscr{L}_3, [\mathscr{L}_1, \mathscr{L}_2]] = \mathscr{O} \tag{7_8}$$

(a = beliebige komplexe Zahl). Man beachte in Gl. (7_6) und (7_7) die Reihenfolge der Faktoren!

Für die Operatorsumme $\mathscr{M}\,\mathscr{L} + \mathscr{L}\,\mathscr{M}$ schreibt man manchmal auch

$$\mathscr{M}\,\mathscr{L} + \mathscr{L}\,\mathscr{M} = [\mathscr{M}, \mathscr{L}]_+ \tag{8}$$

und nennt sie *Antikommutator* zwischen $\mathscr{M}$ und $\mathscr{L}$.

Mit Summe und Produkt von Operatoren sind auch Polynome erklärt.

---

[1]) Aus $[\mathscr{M}, \mathscr{L}] = \mathscr{O}$ und $[\mathscr{N}, \mathscr{L}] = \mathscr{O}$ folgt im allgemeinen nicht die Vertauschbarkeit von $\mathscr{M}$ mit $\mathscr{N}$!

Über Potenzreihen lassen sich damit auch *Operatorfunktionen* $\mathcal{F}(\mathcal{L})$ definieren

$$\mathcal{F}(\mathcal{L}) = a_0 \mathit{1} + a_1 \mathcal{L} + a_2 \mathcal{L}^2 + \cdots, \tag{9}$$

z. B. versteht man unter der Exponentialfunktion eines Operators die Reihe

$$e^{\mathcal{L}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathcal{L}^n. \tag{10}$$

Aus Polynomen in mehreren Operatoren $\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \ldots$ lassen sich entsprechend Operatorfunktionen $\mathcal{F}(\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \ldots)$ definieren. Dabei ist jedoch die Anordnung der Faktoren wegen der im allgemeinen nicht gegebenen Vertauschbarkeit der Operatoren von Wichtigkeit, z. B. ist

$$e^{\mathcal{L}_1+\mathcal{L}_2} \neq e^{\mathcal{L}_1} e^{\mathcal{L}_2}, \text{ wenn } [\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2] \neq \mathcal{O}$$

(vgl. Aufg. 31).

Unter der partiellen *Ableitung* einer Operatorfunktion $\mathcal{F}(\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \ldots)$ nach $\mathcal{L}_1$ versteht man den Operator

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{L}_1} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathcal{F}(\mathcal{L}_1 + \varepsilon \mathit{1}, \mathcal{L}_2, \ldots) - \mathcal{F}(\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \ldots)}{\varepsilon}, \tag{11}$$

dabei ist ε eine gewöhnliche Zahl.[1]) Hieraus ergibt sich nach den Methoden der Differentialrechnung für Summe und Produkt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathcal{L}} (\mathcal{F} + \mathcal{G}) &= \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{L}} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{L}}, \\ \frac{\partial}{\partial \mathcal{L}} (\mathcal{F} \mathcal{G}) &= \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{L}} \mathcal{G} + \mathcal{F} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{L}}, \end{aligned} \tag{12}$$

wobei man aber wieder auf die Reihenfolge der Faktoren achten muß. Für die Differentiation einer Potenz folgt

$$\frac{d}{d\mathcal{L}} \mathcal{L}^n = n \mathcal{L}^{n-1} \tag{13}$$

und hieraus durch gliedweises Differenzieren von Gl. (10) für die Exponentialfunktion

$$\frac{d}{d\mathcal{L}} e^{\mathcal{L}} = e^{\mathcal{L}}. \tag{14}$$

Aufg. 29: Man zeige: Wenn $\mathcal{M}$ mit $\mathcal{L}$ vertauschbar ist, so ist $\mathcal{M}$ auch mit einer Potenzreihe $\mathcal{F}(\mathcal{L})$ vertauschbar.

Aufg. 30: Man beweise die Beziehung

$$\boxed{e^{\mathcal{L}} \mathcal{M} e^{-\mathcal{L}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\mathcal{L}, \mathcal{M}]_{(n)}}, \tag{15}$$

---

[1]) Hängt ein Operator $\mathcal{F}$ von einem Zahlenparameter t ab, $\mathcal{F} = \mathcal{F}(t)$, so bedeutet seine Differentiation nach t

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathcal{F}(t + \varepsilon) - \mathcal{F}(t)}{\varepsilon}. \tag{11a}$$

wenn

$$[\mathscr{L}, \mathscr{M}]_{(0)} = \mathscr{M}, \quad [\mathscr{L}, \mathscr{M}]_{(1)} = [\mathscr{L}, \mathscr{M}], \quad [\mathscr{L}, \mathscr{M}]_{(2)} = [\mathscr{L}, [\mathscr{L}, \mathscr{M}]]$$

und allgemein

$$[\mathscr{L}, \mathscr{M}]_{(n)} = [\mathscr{L}, [\mathscr{L}, \mathscr{M}]_{(n-1)}]$$

gesetzt wird.

Aufg. 31: Man beweise mit Hilfe von Gl. (15) die Relation

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathscr{L} + \mathscr{M}} = \mathrm{e}^{\mathscr{L}}\, \mathrm{e}^{\mathscr{M}}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[\mathscr{L}, \mathscr{M}]}}, \tag{16}$$

falls $[\mathscr{L}, [\mathscr{L}, \mathscr{M}]] = [\mathscr{M}, [\mathscr{L}, \mathscr{M}]] = \mathscr{O}$ erfüllt ist.

§ 2. Dyadisches Produkt. Zerlegung des Einheitsoperators

Wie in der gewöhnlichen Tensorrechnung kann man auch im unitären Raum aus zwei Vektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$ ein *dyadisches Produkt*

$$|u\rangle \langle v| \tag{17}$$

definieren, das — im Gegensatz zum Skalarprodukt $\langle u \mid v\rangle$ — ein *Operator* ist: Wendet man $|u\rangle \langle v|$ auf einen Vektor $|\varphi\rangle$ an, so soll, wie die Schreibweise schon andeutet, der Vektor $|\chi\rangle = |u\rangle \langle v \mid \varphi\rangle$ entstehen

$$\boxed{|\varphi\rangle \xrightarrow{|u\rangle\langle v|} |\chi\rangle = |u\rangle \langle v|\varphi\rangle}. \tag{18}$$

Der neue Vektor $|\chi\rangle$ ist also parallel zu $|u\rangle$ und unterscheidet sich von $|u\rangle$ um den Zahlenfaktor $\langle v \mid \varphi\rangle$. Die Reihenfolge der Vektoren im dyadischen Produkt (17) ist wesentlich, weil $|v\rangle \langle u|$ i. allg. einen anderen Vektor $|\chi'\rangle = |v\rangle \langle u \mid \varphi\rangle$ ergibt. Im folgenden wollen wir zeigen, daß ein beliebiger Operator $\mathscr{L}$ als Summe (bzw. Integral) dyadischer Produkte geschrieben werden kann.

In Kap. 2.1 sahen wir, daß ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle$ eines unitären Raumes nach irgendeinem vollständigen, normierten Orthogonalsystem von Basisvektoren $|v_k\rangle$ entwickelt werden kann

$$|\varphi\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_k |v_k\rangle \langle v_k \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}k. \tag{19}$$

Ziehen wir auf der rechten Seite den Vektor $|\varphi\rangle$ hinter die Summe, so sehen wir, daß der Ausdruck $\mathop{\mathrlap{\int}\sum}_k |v_k\rangle \langle v_k| \, \mathrm{d}k$ auf jeden Vektor $|\varphi\rangle$ wie der Einheitsoperator wirkt.[1]) Man erhält damit die dyadische Darstellung des Einheits-

[1]) In Gl. (19) ist an sich die Reihenfolge von $|v_k\rangle$ und $\langle v_k \mid \varphi\rangle$ gleichgültig. Die gewählte Reihenfolge ist jedoch für den Übergang von der Vektorgleichung (19) zur Operatorgleichung (20) deshalb zweckmäßig, weil dann automatisch die richtige Nomenklatur des dyadischen Produktes entsteht.

operators

$$\boxed{\mathbb{1} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \langle v_k|\, \mathrm{d}k}\,, \tag{20}$$

die man als die *Zerlegung der Einheit nach irgendeinem Satz vollständiger Basisvektoren* bezeichnet. Diese Gleichung, die einerseits als *Bedingung für die Vollständigkeit* eines Systems von Basisvektoren gelesen werden kann, ist andererseits auch für die Ausführung vieler quantentheoretischer Rechnungen von großer Bedeutung: Man kann nämlich in irgendeiner Vektor- oder Operatorgleichung den Einheitsoperator $\mathbb{1}$ einschieben, ohne daß sich dadurch an der Gültigkeit der Gleichung etwas ändert. Ersetzt man dann diese $\mathbb{1}$ nach Gl. (20) durch die Zerlegung nach irgendeinem geeigneten, vollständigen Basissystem $|v_k\rangle$, so ergibt sich dadurch häufig eine zweckmäßige Umformung der Ausgangsgleichung. Wir werden von diesem Trick, den man in physikalischer Sprechweise auch „*Einschieben von Zwischenzuständen* $|v_k\rangle$" nennt, im folgenden häufig Gebrauch machen.

1. *Beispiel:* Liest man das Skalarprodukt $\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\varphi|\mathbb{1}\chi\rangle$, so folgt aus Gl. (20) unmittelbar die Beziehung (2.1–31).

2. *Beispiel:* Schreiben wir für einen Operator $\mathscr{L} = \mathscr{L}\,\mathbb{1}$, so erhalten wir nach Gl. (20) für den Operator $\mathscr{L}$ die Darstellung

$$\mathscr{L} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k |\mathscr{L} v_k\rangle \langle v_k|\, \mathrm{d}k, \tag{21}$$

also eine Summe (bzw. ein Integral) der dyadischen Produkte $|\mathscr{L} v_k\rangle\langle v_k|$.

§ 3. Matrixelemente eines Operators

Zur zahlenmäßigen Erfassung eines Operators ist es notwendig, seine „Komponenten" bezüglich eines (vollständigen, orthonormierten) Basissystems zu kennen. Dazu betrachten wir die Wirkung eines Operators $\mathscr{L}$ auf Basisvektoren $|v_k\rangle$: Jedem Basisvektor $|v_k\rangle$ wird durch $\mathscr{L}$ ein neuer Vektor $|\mathscr{L} v_k\rangle$ zugeordnet (Fig. 34)

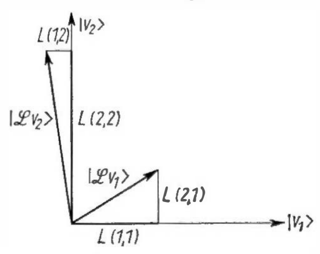


Fig. 34. Zur Definition der Matrixelemente $L(k', k)$ eines Operators $\mathscr{L}$

$$|\mathscr{L} v_k\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} |v_{k'}\rangle\, L(k', k)\, \mathrm{d}k'. \tag{22}$$

Die Komponenten $L(k', k)$ der Vektoren $|\mathscr{L} v_k\rangle$ nennt man die *Matrixelemente* des Operators $\mathscr{L}$ in der Basis $|v_k\rangle$

$$\boxed{L(k', k) = \langle v_{k'}|\mathscr{L} v_k\rangle}\,. \tag{23}$$

Sind die Vektoren $|v_k\rangle$ und $|\mathscr{L} v_k\rangle$ in einer anderen Basis $|u_x\rangle$ vorgegeben, d. h. ihre Komponenten (Funktionen)

$$\left.\begin{aligned} \langle u_x|v_k\rangle &\equiv v_k(x) \equiv v(x, k), \\ \langle u_x|\mathscr{L} v_k\rangle &\equiv \mathscr{L} v_k(x) \equiv \mathscr{L} v(x, k) \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

bekannt, so folgt aus

$$\mathscr{L} = 1\,\mathscr{L} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_x |u_x\rangle\langle u_x|\mathscr{L}\,\mathrm{d}x$$

für die Matrixelemente $\langle v_{k'} \mid \mathscr{L}\, v_k\rangle$ die Beziehung

$$\boxed{L(k', k) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_x v_{k'}^*(x)\,\mathscr{L}\,v_k(x)\,\mathrm{d}x} \,. \tag{25}$$

Durch die Angabe der (i. allg. komplexen) Zahlen $L(k', k)$ ist der Operator $\mathscr{L}$ bestimmt. Ist der zugrunde liegende unitäre Vektorraum n-dimensional, so ist $L(k', k)$ eine Matrix $L_{k'k}$ mit n Zeilen und n Spalten. Im Fall eines unendlich-dimensionalen Raumes hingegen liegt eine Matrix mit unendlich vielen Zeilen und Spalten vor, wenn das Basissystem $|v_k\rangle$ abzählbar unendlich ist [wenn also in Gl. (22) eine unendliche Summe steht]; ist jedoch k kontinuierlich veränderlich — in Gl. (22) steht dann ein Integral —, so ist $L(k', k)$ eine Funktion der kontinuierlichen Variablen k' und k. Wir werden auch in diesem Fall häufig von einer Matrix sprechen.

Jeder Gleichung zwischen Operatoren wird durch Gl. (23) eine Gleichung in Matrixelementen zugeordnet. Im Gegensatz zur Operatorgleichung bezieht sich die Matrizengleichung jedoch auf eine bestimmte Basis des unitären Raums.

Das *Transformationsverhalten* der Matrixelemente eines Operators beim Übergang zu einer anderen Basis [unitäre Transformation (2.1 § 6) — z. B. Fourier-Transformation —] erhält man sofort, wenn man von

$$\mathscr{L} = 1\,\mathscr{L}\,1 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k} |v_{k'}\rangle\langle v_{k'} \mid \mathscr{L}\,v_k\rangle\langle v_k \mid \mathrm{d}k'\,\mathrm{d}k$$

die Matrixelemente $\langle u_{x'} \mid \mathscr{L}\,u_x\rangle$ bildet,

$$\boxed{L(x', x) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k} v(x', k')\,L(k', k)\,v^*(x, k)\,\mathrm{d}k'\,\mathrm{d}k} \,. \tag{26}$$

Die Umkehrung dieser Formel lautet

$$L(k', k) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{x'} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{x} v^*(x', k')\,L(x', x)\,v(x, k)\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x\,. \tag{26a}$$

Mit Hilfe der Matrixelemente eines Operators $\mathscr{L}$ kann man die durch ihn vermittelte *Vektorzuordnung* $|\varphi\rangle \to |\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle$ explizit angeben. Der Zusammenhang zwischen den Komponenten des Vektors $|\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle$ in der Basis $|v_k\rangle$,

$$\langle v_k \mid \mathscr{L}\,\varphi\rangle \equiv \mathscr{L}\,\varphi(k)\,,$$

mit jenen von $|\varphi\rangle$ ergibt sich unmittelbar, wenn man Gl. (21) auf $|\varphi\rangle$ anwendet und auf einen Basisvektor $|v_{k'}\rangle$ projiziert,

$$\boxed{\mathscr{L}\,\varphi(k') = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k} L(k', k)\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k} \,. \tag{27}$$

Zwischen den Komponenten (Funktionen) $\varphi(k)$ und $\mathscr{L}\varphi(k)$ besteht also ein durch die Matrixelemente $L(k', k)$ vermittelter *linearer Zusammenhang.*

Ist im Fall von kontinuierlichem k die Funktion $L(k', k)$ eine Linearkombination von Ableitungen der DIRACschen $\delta(k' - k)$-Funktion (mit k'-abhängigen Koeffizienten)

$$L(k', k) = A(k')\,\delta(k' - k) + B(k')\,\delta'(k' - k) + C(k')\,\delta''(k' - k) + \cdots, \tag{28a}$$

so erhält man

$$\mathscr{L}\varphi(k') = \left[A(k') + B(k')\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k'} + C(k')\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}k'^2} + \cdots\right]\int \delta(k' - k)\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k,$$

d. h., die Funktion $\mathscr{L}\varphi(k)$ entsteht in diesem Fall aus $\varphi(k)$ durch *Differentialoperationen*

$$\boxed{\mathscr{L}\varphi(k) = \left[A(k) + B(k)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} + C(k)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}k^2} + \cdots\right]\varphi(k)}\,. \tag{28b}$$

Bei Funktionen mehrerer kontinuierlicher Veränderlicher, $\varphi(k_1, k_2, \ldots)$, steht in der Klammer ein partieller Differentialausdruck

$$A(k_1, k_2, \ldots) + \sum_i B_i(k_1, k_2, \ldots)\frac{\partial}{\partial k_i} + \sum_{i,j} C_{ij}(k_1, k_2, \ldots)\frac{\partial^2}{\partial k_i\,\partial k_j} + \cdots.$$

Aufg. 32: Wie lauten die Matrixelemente des Einheitsoperators?

Aufg. 33: Man bestimme die Matrixelemente des Produkts $\mathscr{L}\mathscr{M}$ aus denen der Faktoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ (Matrizenmultiplikation).

Aufg. 34: Wie lauten die FOURIER-transformierten Matrixelemente von

a) $L(k', k) = A(k')\,\delta(k' - k)$, b) $L(k', k) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k'}\,\delta(k' - k)$?

Aufg. 35: Wie ist die Gl. (28b) zu erweitern, wenn $\varphi_\sigma(k)$ außer von der kontinuierlichen Variablen k noch von einer Größe σ abhängt, die zwei Werte annehmen kann?

Aufg. 36: Unter der *Spur* eines Operators versteht man die Summe der Diagonalelemente

$$\boxed{\mathrm{Sp}\,\mathscr{L} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k L(k, k)\,\mathrm{d}k}\,. \tag{29}$$

Man zeige, daß diese (komplexe) Zahl unabhängig von der zugrunde gelegten Basis ist.

Aufg. 37: Man beweise

$$\mathrm{Sp}\,\mathscr{L}\mathscr{M} = \mathrm{Sp}\,\mathscr{M}\mathscr{L}.$$

§ 4. Lineare Operatoren mit speziellen Eigenschaften

a) Zueinander inverse Operatoren

Ist die Vektorzuordnung $|\chi\rangle = \mathscr{L}\,|\varphi\rangle$ umkehrbar eindeutig, so ist durch die Umkehrung $|\varphi\rangle = \mathscr{L}^{-1}\,|\chi\rangle$ ein Operator $\mathscr{L}^{-1}$ (oder $\frac{1}{\mathscr{L}}$) definiert, den man zu

$\mathcal{L}$ *invers* nennt. Hieraus ergeben sich sofort die Operatorgleichungen

$$\boxed{\mathcal{L}\,\mathcal{L}^{-1} = \mathcal{L}^{-1}\,\mathcal{L} = 1}, \tag{30}$$

$$\left.\begin{array}{c}(\mathcal{L}^{-1})^{-1} = \mathcal{L}, \quad (a\,\mathcal{L})^{-1} = \frac{1}{a}\,\mathcal{L}^{-1} \quad (a = \text{komplexe Zahl}), \\ (\mathcal{L}\,\mathcal{M})^{-1} = \mathcal{M}^{-1}\,\mathcal{L}^{-1}\ (\text{Reihenfolge!}).\end{array}\right\} \tag{31}$$

Die letzte Beziehung folgt aus $\mathcal{L}\,\mathcal{M}(\mathcal{L}\,\mathcal{M})^{-1} = 1$ durch Multiplikation (von links) mit $\mathcal{L}^{-1}$ und anschließender Multiplikation mit $\mathcal{M}^{-1}$. Weil die Operatoren nicht vertauschbar zu sein brauchen, ist auf die angegebene Reihenfolge zu achten.

Die Operatoren $\mathcal{L}$ und $\mathcal{L}^{-1}$ seien von einem Parameter t abhängig. Die Differentiation von $\mathcal{L}^{-1}$ nach t läßt sich auf jene von $\mathcal{L}$ zurückführen, wenn man Gl. (30) differenziert

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,(\mathcal{L}\,\mathcal{L}^{-1}) = \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{L}^{-1} + \mathcal{L}\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}^{-1}}{\mathrm{d}t} = 0$$

und mit $\mathcal{L}^{-1}$ von links multipliziert

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}^{-1}}{\mathrm{d}t} = -\,\mathcal{L}^{-1}\,\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{L}^{-1}}. \tag{32}$$

In den quantentheoretischen Anwendungen sind „transformierte" Operatoren $\mathcal{F}'$ von Interesse, die aus $\mathcal{F}$ durch einen Operator $\mathcal{A}$ gemäß der Beziehung

$$\mathcal{F}' = \mathcal{A}\,\mathcal{F}\,\mathcal{A}^{-1} \tag{33}$$

entstehen. Ist der Operator $\mathcal{F} = f(\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \ldots)$ eine Funktion von Operatoren $\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2, \ldots,$ so erhält man den transformierten Operator $\mathcal{F}'$, indem man im Argument die transformierten Operatoren $\mathcal{F}'_1, \mathcal{F}'_2, \ldots$ einsetzt:

$$\boxed{\mathcal{A}\,\mathcal{F}\,\mathcal{A}^{-1} = f(\mathcal{A}\,\mathcal{F}_1\,\mathcal{A}^{-1}, \mathcal{A}\,\mathcal{F}_2\,\mathcal{A}^{-1}, \ldots)}. \tag{34}$$

Diese Behauptung ist richtig, wenn f eine Summe oder ein Produkt ist

$$\left.\begin{array}{c}\mathcal{A}\,(\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2)\,\mathcal{A}^{-1} = \mathcal{A}\,\mathcal{F}_1\,\mathcal{A}^{-1} + \mathcal{A}\,\mathcal{F}_2\,\mathcal{A}^{-1}, \\ \mathcal{A}\,\mathcal{F}_1\mathcal{F}_2\,\mathcal{A}^{-1} = \mathcal{A}\,\mathcal{F}_1\,\mathcal{A}^{-1}\cdot\mathcal{A}\,\mathcal{F}_2\,\mathcal{A}^{-1}.\end{array}\right\} \tag{34a}$$

Sie gilt daher auch für Polynome und schließlich durch Grenzübergang auch für Potenzreihen.

b) Zueinander adjungierte Operatoren

Bildet man mit zwei beliebigen Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ das Skalarprodukt $\langle\chi\,|\,\mathcal{L}\,\varphi\rangle$, so kann man nach dem Operator $\mathcal{L}^\dagger$ fragen, für den gilt

$$\boxed{\langle\chi\,|\,\mathcal{L}\,\varphi\rangle = \langle\mathcal{L}^\dagger\,\chi\,|\,\varphi\rangle}. \tag{35}$$

Den hierdurch definierten Operator $\mathscr{L}^\dagger$ nennt man den zu $\mathscr{L}$ *adjungierten* Operator. Ersetzen wir $|\varphi\rangle$ durch $|\chi\rangle$ und umgekehrt, so erhalten wir

$$\langle\varphi\,|\,\mathscr{L}\,\chi\rangle = \langle\mathscr{L}^\dagger\,\varphi\,|\,\chi\rangle.$$

Gehen wir jetzt durch Vertauschen der Reihenfolge im Skalarprodukt zur konjugiert komplexen Gleichung über, so ergibt sich die mit (35) gleichwertige Beziehung

$$\langle\mathscr{L}\,\chi\,|\,\varphi\rangle = \langle\chi\,|\,\mathscr{L}^\dagger\,\varphi\rangle. \tag{36}$$

Wenn man in einem Skalarprodukt einen Operator nach vorne bzw. hinten zieht, so geht der Operator in seinen adjungierten über. Unter Berücksichtigung von Gl. (20) lautet Gl. (36) in Komponenten bezüglich einer Basis

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k (\mathscr{L}\,\chi(k))^*\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \chi^*(k)\,\mathscr{L}^\dagger\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k. \tag{37}$$

Für die *Matrixelemente* folgt aus Gl. (36)

$$\langle v_{k'}\,|\,\mathscr{L}^\dagger\,v_k\rangle = \langle\mathscr{L}\,v_{k'}\,|\,v_k\rangle = \langle v_k\,|\,\mathscr{L}\,v_{k'}\rangle^*$$

oder

$$L^\dagger(k', k) = L(k, k')^*, \tag{38}$$

d. h., die Matrix des adjungierten Operators $\mathscr{L}^\dagger$ ist gleich der adjungierten Matrix von $\mathscr{L}$, die man durch Transposition (Vertauschung von Zeilen und Spalten) und Übergang zum Konjugiert-komplexen erhält.

Der Leser überzeuge sich selbst (Aufg. 38) von der Gültigkeit der Operatorbeziehungen

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{L}^{\dagger\dagger} = \mathscr{L},\quad (\mathscr{L}^{-1})^\dagger = (\mathscr{L}^\dagger)^{-1},\quad (a\,\mathscr{L})^\dagger = a^*\,\mathscr{L}^\dagger,\\ (\mathscr{L}+\mathscr{M})^\dagger = \mathscr{L}^\dagger + \mathscr{M}^\dagger,\quad (\mathscr{L}\,\mathscr{M})^\dagger = \mathscr{M}^\dagger\,\mathscr{L}^\dagger \text{ (Reihenfolge!)}.\end{aligned}\right\} \tag{39}$$

c) Hermitesche Operatoren

Ist ein Operator mit seinem adjungierten Operator identisch, so heißt er *selbstadjungiert* oder HERMITEsch

$$\boxed{\mathscr{H} = \mathscr{H}^\dagger}. \tag{40}$$

Diese in der Quantentheorie besonders wichtigen Operatoren haben die Eigenschaft, daß man sie ohne weiteres im Skalarprodukt „durchziehen" kann

$$\langle\mathscr{H}\,\chi\,|\,\varphi\rangle = \langle\chi\,|\,\mathscr{H}\,\varphi\rangle. \tag{41}$$

In Komponenten lautet diese Gleichung

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k (\mathscr{H}\,\chi(k))^*\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \chi^*(k)\,\mathscr{H}\,\varphi(k)\,\mathrm{d}k. \tag{42}$$

Aus Gl. (38) und (40) folgt, daß die Matrixelemente HERMITEscher Operatoren die Relation

$$H(k', k) = H(k, k')^* \tag{43}$$

erfüllen, d. h., Elemente, die symmetrisch zur Hauptdiagonale liegen, sind zueinander konjugiert-komplex; die Diagonalelemente sind reell. Da diese Bedingung im Reellen auf eine symmetrische Matrix führt, sehen wir, daß die HER-

MITEschen Operatoren gerade die komplexe Erweiterung der symmetrischen Tensoren sind.

Für einen HERMITEschen Operator $\mathcal{H}$ ist das Skalarprodukt $\langle\varphi \mid \mathcal{H}\,\varphi\rangle$ stets *reell.* Entwickelt man $|\varphi\rangle$ nach einer Basis $|v_k\rangle$, so erhält man die sogenannte HERMITEsche Form

$$\langle\varphi \mid \mathcal{H}\,\varphi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{k}\;\mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{k'} H(k, k')\,\varphi^*(k)\,\varphi(k')\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k'. \tag{44}$$

Setzt man diesen Ausdruck gleich einer Konstanten, $\langle\varphi \mid \mathcal{H}\,\varphi\rangle = \text{const}$, so haben wir die mehrdimensionale, komplexe *Verallgemeinerung der Mittelpunktsgleichung einer Kurve 2. Ordnung*

$$H_{11}\varphi_1^2 + 2H_{12}\varphi_1\varphi_2 + H_{22}\varphi_2^2 = \text{const}$$

in den laufenden Koordinaten $\varphi_k = \varphi(k)$ vor uns. Im *Reellen* kann man bekanntlich diese „*Tensorellipse*" bzw. im Dreidimensionalen das „*Tensorellipsoid*" zur Konstruktion der Vektorzuordnung $|\varphi\rangle \to |\mathcal{H}\,\varphi\rangle$ benutzen: Bezeichnet $|\varphi\rangle$ als Radiusvektor einen Punkt auf dieser Kurve bzw. Fläche, so gibt die Normale an dieser Stelle die Richtung des Vektors $|\mathcal{H}\,\varphi\rangle$ an (Fig. 35). — Wenngleich für unitäre Vektoren eine solche geometrische Konstruktion natürlich nicht möglich ist, vermittelt dieses Analogon doch eine gewisse anschauliche Vorstellung von dem Begriff eines HERMITEschen Operators (vgl. dazu Fußnote [1]) S. 110). Wir werden daher in den weiteren Abbildungen die Ellipse als den reellen Repräsentanten für den HERMITEschen Operator verwenden.

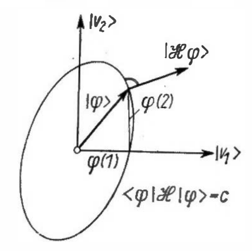


Fig. 35. Reelle Interpretation eines HERMITEschen Operators $\mathcal{H}$

Wir stellen nun einige Formeln für HERMITEsche Operatoren $\mathcal{H}$, $\mathcal{K}$ zusammen, deren Richtigkeit unmittelbar aus den Gl. (39) und (40) ersichtlich ist (Aufg. 38):

$$\left.\begin{aligned}
\mathcal{H} + \mathcal{K} &= \text{HERMITEsch}\\
a\,\mathcal{H} &= \text{HERMITEsch, falls } a \text{ reell}\\
\mathcal{H}^n &= \text{HERMITEsch } (n \text{ positiv oder negativ ganz})\\
\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \sum_n a_n\,\mathcal{H}^n &= \text{HERMITEsch, falls } a_n \text{ reell}\\
\mathcal{H}\mathcal{K} + \mathcal{K}\mathcal{H} = [\mathcal{H}, \mathcal{K}]_+ &= \text{HERMITEsch}\\
\mathcal{H}\mathcal{K} &= \text{HERMITEsch, falls } \mathcal{H}\mathcal{K} = \mathcal{K}\mathcal{H}\\
\mathrm{i}(\mathcal{H}\mathcal{K} - \mathcal{K}\mathcal{H}) = \mathrm{i}[\mathcal{H}, \mathcal{K}] &= \text{HERMITEsch}\\
\mathcal{A}\,\mathcal{H}\,\mathcal{A} &= \text{HERMITEsch für einen beliebigen Operator } \mathcal{A}\\
\frac{\mathrm{d}\mathcal{H}(t)}{\mathrm{d}t} &= \text{HERMITEsch.}
\end{aligned}\right\} \tag{45}$$

d) Unitäre Operatoren

Ein Operator $\mathcal{U}$ heißt *unitär*, wenn sein inverser Operator gleich ist dem adjungierten,

oder
$$\boxed{\begin{gathered}\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}^\dagger \\ \mathcal{U}\,\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^\dagger\,\mathcal{U} = \mathbb{1}\end{gathered}}\,. \tag{46}$$

Es gilt dann für beliebige Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$

$$\langle\chi\,|\,\mathcal{U}\,\varphi\rangle = \langle\mathcal{U}^{-1}\,\chi\,|\,\varphi\rangle \quad \text{und} \quad \langle\mathcal{U}\,\chi\,|\,\varphi\rangle = \langle\chi\,|\,\mathcal{U}^{-1}\,\varphi\rangle, \tag{47}$$

sowie

$$\boxed{\langle\mathcal{U}\,\varphi\,|\,\mathcal{U}\,\chi\rangle = \langle\varphi\,|\,\chi\rangle}\,. \tag{48}$$

Die Skalarprodukte sind bei unitären Transformationen invariant; insbesondere bleiben orthogonale Vektoren orthogonal.

Schreibt man die zweite Gl. (46) in Matrizenform, so erhält man

$$\mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_l U(k,l)\,U(k',l)^*\,\mathrm{d}l = \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_l U(l,k)^*\,U(l,k')\,\mathrm{d}l = \delta(k,k'), \tag{49}$$

eine Beziehung, die wir bereits bei den unitären Basistransformationen (2.1 § 6) kennengelernt haben.

Für unitäre Operatoren $\mathcal{U}, \mathcal{V}$ gelten die folgenden, leicht einsichtigen Sätze (Aufg. 38)

$$\left.\begin{aligned} a\,\mathcal{U} &= \text{unitär, falls } a a^* = 1 \\ \mathcal{U}^n &= \text{unitär } (n \text{ positiv oder negativ ganz}) \\ \mathcal{U}\,\mathcal{V} &= \text{unitär} \\ \mathrm{i}\frac{\mathcal{U}-\mathbb{1}}{\mathcal{U}+\mathbb{1}} &= \text{Hermitesch}, \end{aligned}\right\} \tag{50}$$

und falls $\mathcal{H}$ Hermitesch ist,

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{U}\,\mathcal{H}\,\mathcal{U}^{-1} &= \text{Hermitesch} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{H}} &= \text{unitär} \\ \frac{\mathbb{1}-\mathrm{i}\,\mathcal{H}}{\mathbb{1}+\mathrm{i}\,\mathcal{H}} &= \text{unitär}. \end{aligned}\right\} \tag{51}$$

e) Projektionsoperatoren

Projiziert man einen beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ auf einen vorgegebenen Einheitsvektor $|u\rangle$ (also $\|u\| = 1$), so entsteht in Richtung von $|u\rangle$ der Vektor $|u\rangle\,\langle u\,|\varphi\rangle$ (Fig. 36). Den diese Vektorzuordnung bewirkenden Operator nennt man *Projektionsoperator* $\mathcal{P}_{|u\rangle}$ auf $|u\rangle$

$$\mathcal{P}_{|u\rangle}\,|\varphi\rangle = |u\rangle\,\langle u\,|\,\varphi\rangle. \tag{52}$$

Da diese Gleichung für jeden Vektor $|\varphi\rangle$ gelten soll, ist der Projektionsoperator das dyadische Produkt (§ 2) des Einheitsvektors $|u\rangle$ mit sich selbst,

$$\boxed{\mathscr{P}_{|u\rangle} = |u\rangle\langle u|}\,. \tag{53}$$

Dieser Operator ist linear, HERMITEsch und hat die Eigenschaft

$$\mathscr{P}^2_{|u\rangle} = \mathscr{P}_{|u\rangle}\,. \tag{54}$$

Fig. 36. Reelle Darstellung der Wirkung eines Projektionsoperators $\mathscr{P}_{|u\rangle}$

Die HERMITEizität ist aus

$$\langle\chi\,|\,\mathscr{P}_{|u\rangle}\,\varphi\rangle = \langle\chi\,|\,u\rangle\langle u\,|\,\varphi\rangle = \langle\varphi\,|\,u\rangle^*\langle u\,|\,\chi\rangle^* = \langle\varphi\,|\,\mathscr{P}_{|u\rangle}\,\chi\rangle^* = \langle\mathscr{P}_{|u\rangle}\,\chi\,|\,\varphi\rangle$$

ersichtlich. Die Beziehung (54), die sogenannte „*Einzeloperator-Eigenschaft*“ oder „*Idempotenz*“, folgt nach

$$\mathscr{P}^2_{|u\rangle} = \mathscr{P}_{|u\rangle}|u\rangle\langle u\,| = |u\rangle\langle u\,|\,u\rangle\langle u\,| = |u\rangle\langle u\,| = \mathscr{P}_{|u\rangle}\,.$$

Für orthogonale Vektoren $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ gilt die auch anschaulich unmittelbar einsichtige Beziehung

$$\mathscr{P}_{|u_1\rangle}\,\mathscr{P}_{|u_2\rangle} = \mathscr{O}\,. \tag{55}$$

Die Gleichungen (54) und (55) lassen sich zusammenfassen in die für orthonormierte Vektoren $|u_i\rangle$ gültige Gleichung

$$\mathscr{P}_{|u_i\rangle}\,\mathscr{P}_{|u_k\rangle} = \delta_{ik}\,\mathscr{P}_{|u_i\rangle}\,. \tag{56}$$

Die Matrixelemente von $\mathscr{P}_{|u\rangle}$ in einer Basis $|v_k\rangle$ lauten

$$\langle v_{k'}\,|\,\mathscr{P}_{|u\rangle}\,v_k\rangle = \langle v_{k'}\,|\,u\rangle\langle u\,|\,v_k\rangle = u(k')\,u^*(k)\,. \tag{57}$$

Die Normierung $\|u\| = 1$ bedeutet, daß die Spur [Gl. (29)] von $\mathscr{P}_{|u\rangle}$ eins ist

$$\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{|u\rangle} = 1\,. \tag{58}$$

Nun wollen wir dazu übergehen, die Definition der Projektionsoperatoren auf Vektoren $|u_k^D\rangle$ im DIRACschen Sinn zu erweitern. Der in 2.1 § 3 dargestellte Grenzübergang von HILBERT-Raum-Vektoren $|u_{k,\Delta k}\rangle$ zu DIRAC-Vektoren $|u_k^D\rangle$ liefert

$$\mathscr{P}_{|u_{k,\Delta k}\rangle} = |u_{k,\Delta k}\rangle\langle u_{k,\Delta k}| \;\xrightarrow{\Delta k\to 0}\; |u_k^D\rangle\langle u_k^D|\,\Delta k\,. \tag{59}$$

Es ist daher sinnvoll, „Projektionsoperatoren“ auf DIRAC-Vektoren durch

$$\boxed{\mathscr{P}_{|u_k^D\rangle} \equiv |u_k^D\rangle\langle u_k^D| = \lim_{\Delta k\to 0}\frac{\mathscr{P}_{|u_k,\Delta k\rangle}}{\Delta k}}\;{}^{1)} \tag{60}$$

zu definieren. Diese Operatoren erfüllen nun zwar Gl. (54) nicht mehr, aber die Gl. (56) bleibt weiterhin bestehen, wenn man das KRONECKER-Symbol durch die

[1]) Der Operator $\mathscr{P}_{|u_k^D\rangle}$ hat damit die Eigenschaft einer *Dichte* auf der k-Achse (bzw. im k-Raum).

Diracsche δ-Funktion ersetzt. In einheitlicher Schreibweise gilt also

$$\boxed{\mathscr{P}_{|u_i\rangle}\,\mathscr{P}_{|u_k\rangle} = \delta(i,k)\,\mathscr{P}_{|u_i\rangle}}\,. \tag{61}$$

Neben der Projektion eines Vektors $|\varphi\rangle$ auf einen Vektor $|u\rangle$ ist für die Quantentheorie auch die Projektion auf einen unitären Teilraum $\mathfrak{u}$ des Raumes $\mathfrak{U}$ von Interesse (Fig. 37). Wird dieser Teilraum $\mathfrak{u}$ durch orthonormierte Vektoren $|u_\alpha\rangle$ aufgespannt[1]), so ist der Projektionsoperator $\mathscr{P}_\mathfrak{u}$ auf den Teilraum $\mathfrak{u}$ durch die Summe (bzw. das Integral) der Projektionsoperatoren auf die Vektoren $|u_\alpha\rangle$ gegeben,

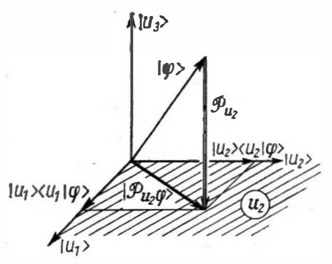


Fig. 37. Reelle Darstellung der Projektion von $|\varphi\rangle$ auf einen zweidimensionalen Teilraum $\mathfrak{u}_2$

$$\boxed{\mathscr{P}_\mathfrak{u} = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\alpha} |u_\alpha\rangle\,\langle u_\alpha|\,\mathrm{d}\alpha}\,. \tag{62}$$

Dieser Operator macht also aus einem beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ in $\mathfrak{U}$ einen Vektor $|\mathscr{P}_\mathfrak{u}\,\varphi\rangle$, der in $\mathfrak{u}$ liegt und die Projektion von $|\varphi\rangle$ auf $\mathfrak{u}$ darstellt. Für alle Vektoren, die in $\mathfrak{u}$ liegen, wirkt $\mathscr{P}_\mathfrak{u}$ wie der Einheitsoperator; für diejenigen, die senkrecht auf dem Teilraum $\mathfrak{u}$ stehen, verhält sich $\mathscr{P}_\mathfrak{u}$ wie der Nulloperator (weil dann $\langle u_\alpha|\varphi\rangle$ für alle α verschwindet).

Der Projektionsoperator $\mathscr{P}_\mathfrak{u}$ ist ebenfalls Hermitesch und hat die Einzeloperator-Eigenschaft

$$\mathscr{P}_\mathfrak{u}^2 = \mathscr{P}_\mathfrak{u}\,.\,^{2)} \tag{63}$$

Die Definition des Projektionsoperators (62) ist unabhängig vom speziellen Basissystem $|u_\alpha\rangle$ des Teilraumes $\mathfrak{u}$ (Aufg. 47).

Aufg. 38: Man beweise die Relationen (39), (45), (50) und (51).

Aufg. 39: Man zeige $\mathrm{Sp}\,\mathscr{A}\,\mathscr{F}\,\mathscr{A}^{-1} = \mathrm{Sp}\,\mathscr{F}$.

Aufg. 40: Wie viele unabhängige, reelle Parameter besitzt die Matrix eines beliebigen Hermiteschen bzw. unitären Operators in einem n-dimensionalen unitären Raum?

Aufg. 41: Man beweise die Unitarität der Matrix

$$\frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta^* & \alpha^*\end{pmatrix} \quad (\alpha,\beta \text{ beliebig komplex}).$$

Aufg. 42: Man untersuche die Hermitezität des Operators $\not{p}$, dargestellt durch

$$\not{p}\,\varphi(x) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x} \quad \text{(Impulsoperator, vgl. 4.1 § 1)},$$

wenn x alle reellen Werte $-\infty < x < +\infty$ annehmen kann.

---

[1]) Bezüglich des Teilraumes $\mathfrak{u}$ seien also die Vektoren $|u_\alpha\rangle$ vollständig.

[2]) In $\mathscr{P}_\mathfrak{u}^2 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\alpha}\mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\alpha'} |u_\alpha\rangle\langle u_\alpha|u_{\alpha'}\rangle\langle u_{\alpha'}|\,\mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\alpha'$ führt $\langle u_\alpha|u_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha,\alpha')$ auf $\mathscr{P}_\mathfrak{u}$.

Aufg. 43: a) Wie lautet der zu $|u\rangle\langle v|$ adjungierte Operator?

b) Man bestimme den Operator $(1 + |u\rangle\langle v|)^{-1}$ und löse mit ihm die Integralgleichung

$$\varphi(x) + u(x) \int_a^b v^*(x')\,\varphi(x')\,dx' = \chi(x)$$

nach $\varphi(x)$ auf.

Aufg. 44: Besitzt der Projektionsoperator $\mathcal{P}_{|u\rangle}$ ein Inverses?

Aufg. 45: Welche Fläche 2. Ordnung ist im dreidimensionalen, reellen Raum einem Projektionsoperator $\mathcal{P}_{|u\rangle}$ zugeordnet?

Aufg. 46: Der unitäre Raum $\mathfrak{U}$ werde in zwei orthogonale Teilräume $\mathfrak{u}_1$ und $\mathfrak{u}_2$ aufgeteilt. Welche Relationen bestehen zwischen $\mathcal{P}_{\mathfrak{u}_1}$ und $\mathcal{P}_{\mathfrak{u}_2}$?

Aufg. 47: Man zeige, daß die Definition (62) unabhängig ist von dem zugrunde gelegten Basissystem des Teilraums $\mathfrak{u}$.

Drittes Kapitel

Das Eigenwertproblem eines Operators

§ 1. Die Eigenwertgleichung

Ein Operator $\mathcal{L}$ erzeugt aus einem beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ einen Vektor $|\mathcal{L}\,\varphi\rangle$, der nicht dieselbe Richtung haben muß wie $|\varphi\rangle$. Wir wollen jetzt nach jenen speziellen Vektoren $|u\rangle$ fragen, für die $|\mathcal{L}\,u\rangle$ *parallel* zu $|u\rangle$ ist (Fig. 38). Diese Vektoren, die man die ***Eigenvektoren*** des Operators $\mathcal{L}$ nennt, genügen also der Gleichung

$$\boxed{|\mathcal{L}\,u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle} \tag{1}$$

(***Eigenwertgleichung*** von $\mathcal{L}$). Die (i. allg. komplexen) Proportionalitätsfaktoren Λ heißen die ***Eigenwerte*** des Operators $\mathcal{L}$. Den zum Eigenwert Λ gehörigen Eigenvektor bezeichnen wir mit $|u_\Lambda\rangle$. Gehören mehrere Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert, so heißt dieser Eigenwert *entartet*.[1]) Die Gesamtheit aller Eigenwerte nennt man das *Spektrum* des Operators. Es kann diskret oder/und kontinuierlich sein.

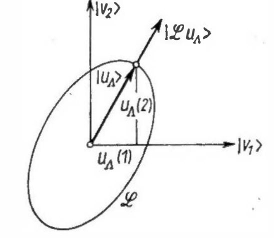


Fig. 38. Zur Veranschaulichung des Eigenwertproblems eines Operators $\mathcal{L}$

Zur Festlegung des Eigenwertproblems eines Operators sei hier folgendes erwähnt: Die Observablen eines physikalischen Systems werden in der Quantentheorie — wie wir noch genauer sehen werden — auf (HERMITEsche) Opera-

[1]) Auf diesen Fall, in dem zur Kennzeichnung der Eigenvektoren neben Λ noch eine weitere Zahl nötig ist, kommen wir im § 5 noch ausführlich zu sprechen.

toren abgebildet. Die physikalischen Relationen zwischen den Observablen werden damit zu Operatorrelationen. *Erst diese Relationen bestimmen die Eigenwerte und Eigenvektoren der einzelnen Operatoren* und führen damit auch zur Konstruktion des unitären Raumes, der für die quantentheoretische Beschreibung des speziellen physikalischen Systems notwendig ist. — An dieser Stelle wollen wir jedoch diese Fragen noch zurückstellen und uns den notwendigen unitären Raum bestimmter Dimension vorgegeben denken. Desgleichen seien in diesem Raum die Operatoren durch ihre Matrixelemente bekannt.

Projiziert man die Eigenwertgleichung (1) auf Basisvektoren $|v_k\rangle$ des unitären Raumes, so erhält man für die *Komponenten* $\langle v_k \mid u_\Lambda\rangle = u_\Lambda(k)$ *der Eigenvektoren* die Gleichung

$$\boxed{\mathscr{L}\, u_\Lambda(k) = \Lambda\, u_\Lambda(k)}\,. \tag{2}$$

Führt man mittels Gl. (2.2–27) die Matrixelemente $L(k, k')$ ein, so ergibt sich

$$\boxed{\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} L(k, k')\, u_\Lambda(k')\, \mathrm{d}k' = \Lambda u_\Lambda(k)}\,. \tag{3}$$

Ist der zugrunde liegende unitäre Raum n-dimensional, so handelt es sich dabei um ein System von *n homogenen, linearen Gleichungen* für die Komponenten $u_\Lambda(k) = u_{k\Lambda}$. Wählt man im Fall eines unendlich dimensionalen Raumes als Basissystem $|v_k\rangle$ Hilbert-Raum-Vektoren, so stellt die Gl. (3) ein abzählbar unendliches, lineares Gleichungssystem dar, benutzt man hingegen Diracsche Vektoren $|v_k^D\rangle$, so ist k kontinuierlich veränderlich, und man erhält eine *homogene, lineare Integralgleichung* für die Eigenfunktionen $u_\Lambda(k)$.

Betrachten wir zunächst den n-dimensionalen Raum. Das Gleichungssystem

$$\sum_{k'=1}^{n} (L_{kk'} - \Lambda\, \delta_{kk'})\, u_{k'\Lambda} = 0 \tag{3a}$$

hat bekanntlich nur dann Lösungen $u_{k'\Lambda} \neq 0$, wenn die Determinante der Koeffizienten verschwindet,

$$\det(L_{kk'} - \Lambda\, \delta_{kk'}) = 0\,. \tag{4}$$

Diese Bedingung ist eine algebraische Gleichung n-ten Grades in Λ, deren Wurzeln die n Eigenwerte

$$\Lambda_1, \quad \Lambda_2, \quad \ldots, \quad \Lambda_n$$

ergeben. Setzt man diese Eigenwerte der Reihe nach in Gl. (3a) ein, so erhält man für jeden Eigenwert nach Auflösung die Komponenten

$$u_{k1}, \quad u_{k2}, \quad \ldots, \quad u_{kn}$$

der Eigenvektoren

$$|u_1\rangle, \quad |u_2\rangle, \quad \ldots, \quad |u_n\rangle\,.$$

Wenn man voraussetzt, daß die Eigenwerte nicht entartet, d. h. also, daß die Wurzeln alle verschieden sind, so sind die Komponenten zu jedem Eigenwert durch das homogene Gleichungssystem nur bis auf einen komplexen Faktor bestimmt. Sein Betrag wird festgelegt, wenn man fordert, daß die Eigenvektoren auf eins normiert sein sollen: $\| u_\Lambda \| = 1$.

Im unendlich-dimensionalen Fall kann man sich bei der Behandlung des unendlichen Gleichungssystems bzw. der Integralgleichung (3) weitgehend von der Theorie endlicher Gleichungssysteme leiten lassen. Wir wollen jedoch hierauf nicht näher eingehen und den Leser auf mathematische Lehrbücher verweisen.

In den physikalisch interessierenden Fällen ist es meistens möglich, solche DIRAC-Vektoren $|v_k^D\rangle$ einzuführen [etwa die Orts- oder Impulseigenvektoren (4.1 § 1)], daß in ihnen die Matrixelemente $L(k, k')$ eine Linearkombination von Ableitungen der DIRACschen $\delta(k - k')$-Funktion, also von der Form (2.2–28a) sind. Dann läßt sich die Integration über k ausführen, und man erhält für $\mathscr{L}\, u_\Lambda(k)$ einen Differentialausdruck (2.2–28b), so daß *die Eigenwertgleichung* (2) *zu einer Differentialgleichung für die Eigenfunktionen $u_\Lambda(k)$ wird,*

$$\left[A(k) + B(k)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} + C(k)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}k^2} + \cdots\right] u_\Lambda(k) = \Lambda\, u_\Lambda(k)\,. \tag{3b}$$

Im Fall mehrerer kontinuierlicher Veränderlicher $k_1, k_2, \ldots$ entsteht eine *partielle Differentialgleichung.*[1]) Ein Beispiel hierfür bietet die SCHRÖDINGER-Gleichung (1.5–7), deren Eigenwertproblem wir im Eindimensionalen in 1.5 § 4 ausführlich diskutierten.

Läßt man als Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ nur HILBERT-Raum-Vektoren zu, so erhält man die *diskreten* Eigenwerte Λ (weil es nur abzählbar unendlich viele HILBERT-Raum-Vektoren gibt). Die Eigenfunktionen $u_\Lambda(k) = \langle v_k \mid u_\Lambda\rangle$ müssen dann *quadratintegrabel* sein (2.1 § 5), sie dürfen also z. B. für $k \to \pm\infty$ nicht divergieren. Wir erinnern uns, daß diese Bedingung schon in 1.5 § 4 aus der allgemeinen Lösungsmannigfaltigkeit der SCHRÖDINGER-Gleichung die Eigenfunktionen ausgesondert hat. — Die (endliche) Länge $\|u_\Lambda\|$ des Eigenvektors wird durch die Eigenwertgleichung nicht festgelegt, weil mit $|u_\Lambda\rangle$ auch $a\,|u_\Lambda\rangle$ (a = komplexe Zahl) die Eigenwertgleichung erfüllt. Den Betrag von a setzt man wieder so fest, daß die Eigenvektoren *auf eins normiert* sind

$$\langle u_\Lambda \mid u_\Lambda\rangle = \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k |u_\Lambda(k)|^2\,\mathrm{d}k = 1\,. \tag{5}$$

Die Phase von a hingegen bleibt unbestimmt.

---

[1]) Ist $u_{\sigma\Lambda}(k)$, außer von kontinuierlichen Variablen k noch von Größen σ abhängig, die nur diskrete Werte annehmen können, so entsteht wegen der Summe in Gl. (3) ein *Differentialgleichungssystem* (vgl. Aufg. 35).

Um in einfacher Weise zu den *kontinuierlichen Eigenwerten* Λ zu gelangen, lassen wir auch noch Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ im DIRACschen Sinne zu.[1]) Wir werden nämlich im nächsten Abschnitt sehen, daß für HERMITEsche Operatoren (und ebenso auch für die unitären) die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind, $\langle u_\Lambda \mid u_{\Lambda'}\rangle = 0$ für $\Lambda \neq \Lambda'$, so daß bei kontinuierlichem Λ die Orthonormierung der Eigenvektoren auf $\delta(\Lambda - \Lambda')$ möglich ist. Die Bedeutung dieser Eigenvektoren im DIRACschen Sinn liegt darin, daß man durch Integration über ein kleines Λ-Intervall einen HILBERT-Raum-Vektor erhält (2.1 § 3)

$$|u_{\Lambda,\Delta\Lambda}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta\Lambda}} \int_{\Lambda}^{\Lambda+\Delta\Lambda} |u^D_{\Lambda'}\rangle \, \mathrm{d}\Lambda', \tag{6}$$

der aber nur noch näherungsweise Eigenvektor ist (vgl. Aufg. 49). Diese Methode der „*Wellenpaketbildung*" und die damit verbundene Begründung der Verwendung der auf δ-Funktion normierten Eigenfunktionen ist uns bereits von der Behandlung der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung (Kap. 1.5) her bekannt. Wir werden in der Quantentheorie ebenfalls darauf zurückkommen.

§ 2. Sätze über das Eigenwertproblem Hermitescher Operatoren

Für HERMITEsche Operatoren wollen wir einige allgemeine Aussagen über ihre Eigenvektoren und Eigenwerte beweisen, die für die Anwendung in der Quantentheorie von fundamentaler Bedeutung sind. Dabei werde zunächst von einer Entartung der Eigenwerte abgesehen.

Multipliziert man die Eigenwertgleichung (1) mit irgendeinem Eigenvektor, so erhält man unter Benützung der jetzt vorausgesetzten HERMITEizität von $\mathscr{L}$

$$\langle u_{\Lambda'} \mid \mathscr{L}\, u_\Lambda\rangle = \Lambda \langle u_{\Lambda'} \mid u_\Lambda\rangle$$

$$= \langle \mathscr{L}\, u_{\Lambda'} \mid u_\Lambda\rangle = \Lambda'^* \langle u_{\Lambda'} \mid u_\Lambda\rangle$$

oder

$$(\Lambda - \Lambda'^*) \langle u_{\Lambda'} \mid u_\Lambda\rangle = 0. \tag{7}$$

Im Fall $\Lambda' = \Lambda$ ergibt sich hieraus — weil $\|u_\Lambda\| \neq 0$ sein soll —, daß die *Eigenwerte* HERMITE*scher Operatoren reell* sind,

$$\boxed{\Lambda = \Lambda^* = \text{reell}}\,. \tag{8}$$

---

[1]) In der strengen Theorie des HILBERT-Raumes gibt es zu den kontinuierlichen Eigenwerten keine Eigenvektoren. Um das Kontinuum zu erfassen, ersetzt man dort die Lösung der Eigenwertgleichung durch die Bestimmung der „*Spektraldarstellung*" [vgl. Gl. (2.3–15)] von $\mathscr{L}$, in der man die Eigenvektoren vermeiden kann (v. NEUMANN). Für die praktischen physikalischen Probleme ist jedoch die DIRACsche Methode einfacher und wirkungsvoller. — An dieser Stelle sei außerdem erwähnt, daß das Eigenwertproblem wesentlich vom Definitionsbereich (S. 122) des Operators im HILBERT-Raum abhängt. Es kann sogar passieren, daß ein Operator damit überhaupt kein lösbares Eigenwertproblem mehr besitzt. HERMITEsche Operatoren, bei denen jedoch das Eigenwertproblem *lösbar* ist, nennt man — aus einem Grund, den wir hier nicht erläutern können — *hypermaximal.* Wir wollen unsere Betrachtungen auf solche beschränken.

Für $\Lambda' \neq \Lambda$ hingegen muß in (7) das Skalarprodukt verschwinden: *Die Eigenvektoren eines* HERMITE*schen Operators sind zueinander orthogonal.* Zusammen mit der Normierung der Eigenvektoren auf 1 bzw. δ-Funktion können wir daher schreiben

$$\boxed{\langle u_{\Lambda'} \mid u_\Lambda \rangle = \delta(\Lambda', \Lambda)}\,. \tag{9}$$

Setzt man in diese Gleichung die Entwicklung der Eigenvektoren nach einer Basis $|v_k\rangle$ ein,

$$|u_\Lambda\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |v_k\rangle\, u_\Lambda(k)\, \mathrm{d}k\,,$$

so erhält man wegen der Orthonormierung der $|v_k\rangle$

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k u^*_{\Lambda'}(k)\, u_\Lambda(k)\, \mathrm{d}k = \delta(\Lambda', \Lambda)\,. \tag{10}$$

Das heißt, die Komponenten der Eigenvektoren bzw. die Eigenfunktionen $u_\Lambda(k)$ bilden eine unitäre Matrix, $u_\Lambda(k) = u(k, \Lambda)$.

Aus der Eigenwertgleichung und Gl. (9) folgt

$$\boxed{\langle u_{\Lambda'} \mid \mathscr{L}\, u_\Lambda \rangle = \Lambda\, \delta(\Lambda', \Lambda)}\,. \tag{11}$$

Das heißt, *die Matrix eines Operators, gebildet mit seinen Eigenvektoren, ist diagonal. Die Diagonalelemente sind seine Eigenwerte.* Setzt man auf der linken Seite wieder die Entwicklung der $|u_\Lambda\rangle$ nach einer Basis $|v_k\rangle$ ein, so ergibt sich

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'} u^*_{\Lambda'}(k')\, L(k', k)\, u_\Lambda(k)\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k' = \Lambda\, \delta(\Lambda', \Lambda)\,, \tag{12}$$

d. h., die Diagonalisierung der Matrix eines Operators geschieht durch die unitäre Transformation, die aus den Komponenten der Eigenvektoren bzw. aus den Eigenfunktionen besteht.

Aufg. 48: Wie lauten die Eigenwerte und Eigenvektoren einer zweidimensionalen Matrix

$$\langle v_{k'} \mid \mathscr{L}\, v_k \rangle = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}\ ?$$

Unter welcher Bedingung fallen die Eigenwerte zusammen?

Aufg. 49: Wie lauten die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Impulsoperators (Aufg. 42)? Welcher HILBERT-Raum-Vektor ergibt sich, wenn man über ein Intervall $p \ldots p + \Delta p$ integriert?

Aufg. 50: Man beweise die Relation

$$\mathscr{L}\, \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} = \Lambda\, \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,.$$

Aufg. 51: Man zeige, daß die Operatoren $\mathscr{L}^{-1}$ und $\mathscr{L}^\dagger$ dieselben Eigenvektoren besitzen wie $\mathscr{L}$, und daß ihre Eigenwerte Λ^{-1} bzw. Λ^* sind.

Aufg. 52: Man zeige, daß die Eigenwerte eines unitären Operators komplexe Zahlen vom Betrag 1 sind.

§ 3. Die $\mathscr{L}$-Darstellung des unitären Vektorraumes

Wir wollen jetzt voraussetzen, daß die Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ des Operators $\mathscr{L}$ nicht nur *orthonormiert*, sondern auch *vollständig* in dem zugrunde liegenden unitären Raum sind. Es gilt also

$$\boxed{\langle u_\Lambda | u_{\Lambda'}\rangle = \delta(\Lambda, \Lambda') \quad \text{und} \quad \mathop{\not{\sum}\!\!\!\int}_\Lambda |u_\Lambda\rangle\langle u_\Lambda| \, d\Lambda = \mathbb{1}} \, . \tag{13}$$

Damit ist gewährleistet, daß sich jeder Vektor $|\varphi\rangle$ des unitären Raumes nach den Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ entwickeln läßt

$$\boxed{|\varphi\rangle = \mathop{\not{\sum}\!\!\!\int}_\Lambda |u_\Lambda\rangle \, \varphi(\Lambda) \, d\Lambda, \quad \varphi(\Lambda) = \langle u_\Lambda | \varphi\rangle} \, . \tag{14}$$

Die Eigenvektoren u_Λ von $\mathscr{L}$ übernehmen die Rolle der Basisvektoren. Man spricht von der „*$\mathscr{L}$-Darstellung*" des unitären Raumes. *Die Komponenten eines Vektors $|\varphi\rangle$ sind in der $\mathscr{L}$-Darstellung Funktionen $\varphi(\Lambda)$ der Eigenwerte Λ des Operators $\mathscr{L}$.* — Da in der Quantentheorie die physikalisch meßbaren Größen, wie Ort, Impuls, Energie durch Operatoren beschrieben werden, spricht man also speziell von Orts-, Impuls- oder Energiedarstellung, wenn die Eigenvektoren einer dieser Operatoren als Basis zugrunde gelegt werden. Die Komponenten eines Vektors sind dann Funktionen der Orts-, Impuls- oder Energieeigenwerte. Der Vorteil einer unitär-vektoriellen Formulierung der Quantentheorie — unabhängig von einer speziellen Darstellung — liegt nun gerade darin, daß man je nach der Fragestellung eines individuellen Problems in die jeweils zweckmäßigste Darstellung durch entsprechende Skalarproduktbildung übergehen kann.

In seiner eigenen Darstellung hat ein Operator sehr einfache Eigenschaften. Die dyadische Schreibweise [Gl. (2.2–21)] eines Operators $\mathscr{L}$ vereinfacht sich in seinen Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ zu der wichtigen Beziehung

$$\boxed{\mathscr{L} = \mathop{\not{\sum}\!\!\!\int}_\Lambda \Lambda \, |u_\Lambda\rangle\langle u_\Lambda| \, d\Lambda = \mathop{\not{\sum}\!\!\!\int}_\Lambda \Lambda \, \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} \, d\Lambda} \, , \tag{15}$$

die man die „*Spektraldarstellung*" von $\mathscr{L}$ nennt.[1]) *Sie führt einen Operator zurück auf die Gesamtheit der zu seinen Eigenvektoren gehörigen Projektionsoperatoren.* Wegen der einfachen Eigenschaften der Projektionsoperatoren kann man sich bei manchen Rechnungen der Spektraldarstellung mit Vorteil bedienen.

---

[1]) Für den Einheitsoperator $\mathbb{1}$ ist jeder Vektor ein Eigenvektor zum Eigenwert 1. Daher ist die Zerlegung der Einheit [Gl. (2.2–20)] ein Spezialfall von Gl. (15).

Für das Skalarprodukt $\langle\varphi\,|\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle$ folgt damit in der $\mathscr{L}$-Darstellung unmittelbar

$$\langle\varphi\,|\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} \Lambda\,\varphi^*(\Lambda)\,\varphi(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda\,, \tag{16}$$

eine Formel, die analog zur Hauptachsenform bei Kegelschnitten [1]) ist.

Für die Komponenten des Vektors $|\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle$ in der $\mathscr{L}$-Darstellung ergibt Gl. (15)

$$\langle u_{\Lambda'}\,|\,\mathscr{L}\,\varphi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} \Lambda\,\delta(\Lambda',\Lambda)\,\langle u_\Lambda\,|\,\varphi\rangle\,\mathrm{d}\Lambda = \Lambda'\,\langle u_{\Lambda'}\,|\,\varphi\rangle$$

oder

$$\boxed{\mathscr{L}\varphi(\Lambda) = \Lambda\,\varphi(\Lambda)}\,. \tag{17}$$

Das heißt, *die Funktion $\mathscr{L}\varphi(\Lambda)$ entsteht aus $\varphi(\Lambda)$ einfach durch Multiplikation mit dem Zahlenfaktor Λ.*

Das Quadrat eines Operators $\mathscr{L}$ hat nach Gl. (15) die Spektraldarstellung

$$\mathscr{L}^2 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda'} \Lambda\Lambda'\,\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathscr{P}_{|u_{\Lambda'}\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda\,\mathrm{d}\Lambda'\,,$$

die sich jedoch wegen der Produkteigenschaft (2.2–61) der Projektionsoperatoren zu

$$\mathscr{L}^2 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} \Lambda^2\,\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda$$

vereinfacht. Eine entsprechende Beziehung erhält man für die n-te Potenz von $\mathscr{L}$. Für eine *Operatorfunktion* $\mathscr{F}(\mathscr{L})$, die durch eine Potenzreihe darstellbar ist, ergibt sich daher

$$\begin{aligned}\mathscr{F}(\mathscr{L}) &= a_0\,\mathbf{1} + a_1\,\mathscr{L} + a_2\,\mathscr{L}^2 + \cdots\\ &= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} (a_0 + a_1\,\Lambda + a_2\,\Lambda^2 + \cdots)\,\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda\,,\end{aligned}$$

d. h., es gilt die Spektraldarstellung

$$\boxed{\mathscr{F}(\mathscr{L}) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} F(\Lambda)\,\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda}\,. \tag{18}$$

Der Operator $\mathscr{F} = \mathscr{F}(\mathscr{L})$ hat also dieselben Eigenvektoren wie der Operator $\mathscr{L}$. Die Funktion, als Zahlenfunktion gelesen, liefert die zugehörigen Eigenwerte $F = F(\Lambda)$,

$$\mathscr{F}(\mathscr{L})\,|u_\Lambda\rangle = F(\Lambda)\,|u_\Lambda\rangle\,. \tag{19}$$

---

[1]) Die Eigenwerte Λ sind proportional zu den reziproken Achsenabschnitten des Kegelschnitts.

Die Spektraldarstellung (18) kann man andererseits auch zur Definition einer *beliebigen Operatorfunktion* $\mathcal{F}(\mathcal{L})$ — die nicht mehr durch eine Potenzreihe darstellbar zu sein braucht — benutzen, indem man auf der rechten Seite der Gleichung diese Funktion als $F(\Lambda)$ einsetzt und $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathcal{L})$ dadurch definiert.

Fordert man z. B., daß die Funktion $F(\Lambda)$ für alle $\Lambda \neq \Lambda'$ Null und für $\Lambda = \Lambda'$ entweder eins oder unendlich ist (je nachdem, ob das Spektrum von $\mathcal{L}$ an der Stelle Λ' diskret oder kontinuierlich ist),

$$F(\Lambda) = \delta(\Lambda, \Lambda'), \tag{20a}$$

so läßt sich in Gl. (18) die Summe (bzw. das Integral) ausführen, und man erhält

$$\mathcal{F}(\mathcal{L}) = \mathcal{P}_{|u_{\Lambda'}\rangle}. \tag{20b}$$

Der Projektionsoperator auf einen Eigenvektor von $\mathcal{L}$ wird als Funktion von $\mathcal{L}$ gelesen.

§ 4. Die gemeinsamen Eigenvektoren vertauschbarer Operatoren

Wendet man auf die Eigenwertgleichung

$$\mathcal{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle$$

einen Operator $\mathcal{M}$ an, der mit $\mathcal{L}$ *vertauschbar* ist, so ergibt sich

$$\mathcal{M}\,\mathcal{L}\,|u_\Lambda\rangle = \mathcal{L}\,\mathcal{M}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,\mathcal{M}\,|u_\Lambda\rangle. \tag{21}$$

Die letzte Gleichung bedeutet, daß $\mathcal{M}\,|u_\Lambda\rangle$ ebenfalls Eigenvektor von $\mathcal{L}$ zum Eigenwert Λ ist, d. h. — wenn wir den Fall einer Entartung zunächst ausschließen (vgl. § 5) —, $\mathcal{M}\,|u_\Lambda\rangle$ ist proportional $|u_\Lambda\rangle$,

$$\mathcal{M}\,|u_\Lambda\rangle = M_\Lambda\,|u_\Lambda\rangle. \tag{22}$$

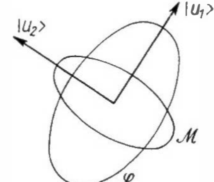


Fig. 39. Vertauschbare Operatoren haben dieselben Eigenvektoren

Die $|u_\Lambda\rangle$ sind also auch Eigenvektoren von $\mathcal{M}$. Damit haben wir den wichtigen Satz gewonnen: *Vertauschbare Operatoren haben dieselben Eigenvektoren* (Fig. 39). Ihre Matrizen sind also in derselben Basis diagonal.

Außerdem gilt auch die Umkehrung dieses Satzes: *Haben zwei Operatoren $\mathcal{L}$ und $\mathcal{M}$ denselben (vollständigen) Satz von Eigenvektoren, so sind sie miteinander vertauschbar.* Aus den Spektraldarstellungen

$$\mathcal{L} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Lambda \Lambda\,\mathcal{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda \quad \text{und} \quad \mathcal{M} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Lambda M_\Lambda\,\mathcal{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda$$

folgt nämlich wegen Gl. (2.2-61) für das Produkt

$$\mathcal{L}\,\mathcal{M} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Lambda \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\Lambda'} \Lambda\,M_{\Lambda'}\,\mathcal{P}_{|u_\Lambda\rangle}\,\mathcal{P}_{|u_{\Lambda'}\rangle}\,\mathrm{d}\Lambda\,\mathrm{d}\Lambda' = \mathcal{M}\,\mathcal{L}\,.$$

§ 5. Entartung

Bisher wurde vorausgesetzt, daß das Eigenwertproblem nicht entartet ist, d. h., daß zu jedem Eigenwert genau *ein* Eigenvektor gehört. Wird die Eigenwertgleichung für einen Eigenwert Λ durch *mehrere*, linear unabhängige Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ erfüllt,

$$\mathscr{L}\,|u_\Lambda^\mu\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda^\mu\rangle, \qquad \mu = 1, \ldots, t_\Lambda, \tag{23}$$

so heißt der Eigenwert Λ *entartet*. Wir sagen, der Eigenwert Λ ist t_Λ-fach[1]), wenn genau t_Λ unabhängige Vektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ die Eigenwertgleichung befriedigen. Wegen der Linearität von $\mathscr{L}$ ist auch jede Linearkombination dieser Vektoren

$$|\tilde{u}_\Lambda\rangle = \sum_{\mu=1}^{t_\Lambda} |u_\Lambda^\mu\rangle\, c_\Lambda^\mu \tag{24}$$

mit beliebigen (komplexen) Koeffizienten c_Λ^μ wieder Eigenvektor von $\mathscr{L}$ zum Eigenwert Λ. Die t_Λ Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ spannen einen t_Λ-dimensionalen, unitären Teilraum $\mathfrak{u}_{t_\Lambda}$ in $\mathfrak{U}$ auf, den man den zum Eigenwert Λ gehörigen *Eigenraum* nennt[2]).

Im anschaulichen Bild des Tensorellipsoids bedeutet etwa ein zweifacher Eigenwert, daß zwei Hauptachsen gleich lang sind: Es liegt ein *Rotationsellipsoid* vor. Die Ebene dieser Hauptachsen schneidet das Ellipsoid in einem *Kreis. Daher ist jeder Vektor dieser Ebene ein Eigenvektor*, die Ebene ist der zwei-dimensionale Eigenraum $\mathfrak{u}_2$ (Fig. 40).

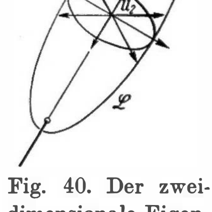


Fig. 40. Der zweidimensionale Eigenraum $\mathfrak{u}_2$ eines Rotationsellipsoids

Im § 2 wurde gezeigt, daß die Eigenvektoren eines Hermiteschen Operators aufeinander senkrecht stehen. Dieser Beweis der Orthogonalität bleibt im Fall einer Entartung bezüglich der Indizes Λ der Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ bestehen (*Orthogonalität der Eigenräume*). Er versagt jedoch bezüglich der Entartungsindizes μ, weil wegen des Verschwindens der Eigenwertdifferenz aus Gl. (7) nicht mehr auf die Orthogonalität der $|u_\Lambda^\mu\rangle$ (bei festem Λ) geschlossen werden kann

$$\langle u_\Lambda^\mu \,|\, u_\Lambda^{\mu'}\rangle \neq \delta^{\mu\mu'}.$$

---

[1]) In der mathematischen Literatur sagt man „er ist $(t_\Lambda - 1)$-fach entartet".

[2]) Wenn der Eigenwert ∞-fach ist, wird aus der endlichen Summe in Gl. (24) und in den folgenden Gleichungen eine unendliche Summe oder ein Integral über die Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$, die den zum Eigenwert Λ gehörigen ∞-dimensionalen Eigenraum $\mathfrak{u}$ (Teilraum von $\mathfrak{U}$) aufspannen

$$|\tilde{u}_\Lambda\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{\mu} |u_\Lambda^\mu\rangle\, c_\Lambda^\mu\, d\mu. \tag{24a}$$

Es ist jedoch im Eigenraum $\mathfrak{u}_{t_\Lambda}$ nach Gl. (24) möglich, an Stelle der $|u_\Lambda^\mu\rangle$ andere Eigenvektoren

$$|\hat{u}_\Lambda^\mu\rangle = \sum_{\bar{\mu}=1}^{t_\Lambda} |u_\Lambda^{\bar{\mu}}\rangle\, c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu} \qquad (\mu = 1, \ldots, t_\Lambda) \tag{25}$$

einzuführen, die ebenfalls diesen Eigenraum aufspannen. Wenn man nun fordert, daß die $|\hat{u}_\Lambda^\mu\rangle$ orthonormiert sein sollen, müssen die Koeffizienten $c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu}$ so gewählt werden, daß sie die Bedingungen

$$\langle \hat{u}_\Lambda^\mu \mid \hat{u}_\Lambda^{\mu'}\rangle = \sum_{\bar{\mu},\bar{\bar{\mu}}}^{t_\Lambda} \langle u_\Lambda^{\bar{\mu}} \mid u_\Lambda^{\bar{\bar{\mu}}}\rangle\, c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu *}\, c_\Lambda^{\bar{\bar{\mu}}\mu'} = \delta^{\mu\mu'} \tag{26}$$

erfüllen. Dies sind für $\mu = \mu'$ t_Λ reelle Gleichungen, für $\mu > \mu'$ $\frac{t_\Lambda(t_\Lambda - 1)}{2}$ komplexe Gleichungen, also insgesamt t_Λ^2 reelle Bedingungsgleichungen[1]). Andererseits besteht die Koeffizientenmatrix $c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu}$ aus t_Λ^2 komplexen oder $2t_\Lambda^2$ reellen Zahlen, so daß man sicher solche $c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu}$ finden kann, damit Gl. (26) erfüllt ist. Damit ist es auch im Fall eines entarteten Eigenwertproblems immer möglich, orthonormierte Eigenvektoren einzuführen,

$$\langle \hat{u}_\Lambda^\mu \mid \hat{u}_{\Lambda'}^{\mu'}\rangle = \delta(\Lambda, \Lambda')\, \delta(\mu, \mu'). \tag{27}$$

Für die praktische Durchführung der Orthogonalisierung entarteter Zustände kann man sich des SCHMIDTschen Verfahrens bedienen: Hat man einen Satz nichtorthogonaler, aber normierter Eigenvektoren $|u^1\rangle, |u^2\rangle, \ldots$ (Λ = fest) des Eigenraums, so findet man orthonormierte Eigenvektoren $|\hat{u}^1\rangle, |\hat{u}^2\rangle, \ldots$, indem man willkürlich

$$|\hat{u}^1\rangle = |u^1\rangle$$

wählt, und für $|\hat{u}^2\rangle$ eine Linearkombination aus $|u^1\rangle$ und $|u^2\rangle$,

$$a\,|\hat{u}^2\rangle = |u^1\rangle\, b + |u^2\rangle,$$

ansetzt (Fig. 41). Die Orthogonalitätsforderung $\langle \hat{u}^1 | \hat{u}^2\rangle = 0$ führt auf

$$0 = \langle u^1 \mid u^1\rangle\, b + \langle u^1 \mid u^2\rangle,$$

d. h. wegen $\langle u^1 \mid u^1\rangle = 1$

$$b = -\langle u^1 \mid u^2\rangle.$$

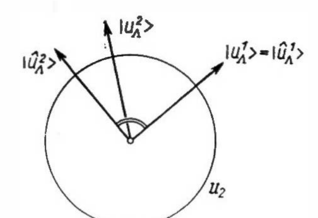


Fig. 41. Zum SCHMIDTschen Orthogonalisierungsverfahren im Eigenraum $\mathfrak{u}_2$

Die Normierungsbedingung $\langle \hat{u}^2 \mid \hat{u}^2\rangle = 1$ liefert den Betrag von a. Damit sind zwei orthonormierte Eigenvektoren $|\hat{u}^1\rangle$ und $|\hat{u}^2\rangle$ gefunden. Gibt es noch weitere Eigenvektoren zum gleichen Eigenwert, fährt man so fort.

Durch die Orthonormierungsbedingung (26) werden von den $2t_\Lambda^2$ reellen Bestimmungszahlen der Matrix $c_\Lambda^{\bar{\mu}\mu}$ nur t_Λ^2 festgelegt. Die verbleibenden t_Λ^2 unbe-

[1]) Die Gleichungen $\mu < \mu'$ sind konjugiert komplex zu jenen mit $\mu > \mu'$ und liefern daher keine weiteren Bedingungen.

stimmten Anteile bedeuten, daß die orthonormierten Eigenvektoren $|\hat{u}_\Lambda^\mu\rangle$ nur bis auf unitäre Transformationen im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ bestimmt sind, da eine solche gerade t_Λ^2 reelle Bestimmungszahlen besitzt (Aufg. 40). Hat man irgendeinen Satz orthonormierter Eigenvektoren $|\hat{u}_\Lambda^\mu\rangle$ vorliegen, so sind alle durch unitäre Transformationen daraus entstehenden Vektoren

$$|\hat{\hat{u}}_\Lambda^\mu\rangle = \sum_{\mu'} |\hat{u}_\Lambda^{\mu'}\rangle \, a_\Lambda^{\mu'\mu} \tag{28}$$

wieder orthonormierte Eigenvektoren (Fig. 42).

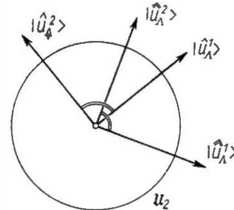


Fig. 42. Orthonormierte Eigenvektoren $|\hat{u}_\Lambda^\mu\rangle$ und $|\hat{\hat{u}}_\Lambda^\mu\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_2$

Abschließend wollen wir den im § 4 angegebenen Satz, wonach *vertauschbare* Operatoren dieselben Eigenvektoren besitzen, für Operatoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ mit entartetem Eigenwertspektrum modifizieren. Nach dem vorher Gesagten können wir voraussetzen, daß die Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ von $\mathscr{L}$,

$$\mathscr{L} \, |u_\Lambda^\mu\rangle = \Lambda \, |u_\Lambda^\mu\rangle,$$

bereits orthonormiert sind. Aus der zu Gl. (21) analogen Gleichung

$$\mathscr{L} \mathscr{M} \, |u_\Lambda^\mu\rangle = \Lambda \mathscr{M} \, |u_\Lambda^\mu\rangle$$

folgt wieder, daß $|\mathscr{M} \, u_\Lambda^\mu\rangle$ Eigenvektor von $\mathscr{L}$ zum Eigenwert Λ ist. Wegen der Entartung von Λ kann man aber jetzt zunächst nur schließen, daß $|\mathscr{M} \, u_\Lambda^\mu\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_{t_\Lambda}$ von $\mathscr{L}$ liegt, also eine Linearkombination

$$|\mathscr{M} \, u_\Lambda^\mu\rangle = \sum_{\mu'=1}^{t_\Lambda} |u_\Lambda^{\mu'}\rangle \, M_\Lambda^{\mu'\mu} \tag{29}$$

ist. Die Matrix

$$M_\Lambda^{\mu'\mu} = \langle u_\Lambda^{\mu'} \, | \mathscr{M} \, u_\Lambda^\mu\rangle$$

kann man aber — jedenfalls wenn wir uns auf HERMITEsche oder unitäre Operatoren beschränken — in diesem Eigenraum durch eine unitäre Transformation

$$|\tilde{u}_\Lambda^\mu\rangle = \sum_{\mu'} |u_\Lambda^{\mu'}\rangle \, U_\Lambda^{\mu'\mu}$$

diagonalisieren. Damit geht Gl. (29) in die Eigenwertgleichung für den Operator $\mathscr{M}$ über

$$|\mathscr{M} \, \tilde{u}_\Lambda^\mu\rangle = M_\Lambda^\mu \, |\tilde{u}_\Lambda^\mu\rangle. \tag{30}$$

Je nach den individuellen Eigenschaften des Operators $\mathscr{M}$ können die Eigenwerte M_Λ^μ alle verschieden oder auch einige gleich sein. Jedenfalls erhalten wir das Ergebnis, daß man es immer so einrichten kann, *daß vertauschbare Operatoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ ein gleiches System von Eigenvektoren besitzen.*

§ 6. Beispiel: Die Eigenwertgleichung von Projektionsoperatoren

Die Eigenwertgleichung eines Projektionsoperators $\mathscr{P}_{|u\rangle}$, der auf einen Einheitsvektor $|u\rangle$ projiziert, hat die einfache Gestalt

$$\mathscr{P}_{|u\rangle} \, |u_\Lambda\rangle \equiv |u\rangle \, \langle u \, | \, u_\Lambda\rangle = \Lambda \, |u_\Lambda\rangle. \tag{31}$$

Hieraus folgt unmittelbar, daß *ein* Eigenvektor die Richtung von $|u\rangle$ hat, und der zugehörige Eigenwert 1 ist,

$$\Lambda = 1, \quad |u_1\rangle = |u\rangle. \tag{32}$$

Die anderen Eigenvektoren stehen alle senkrecht auf $|u\rangle$ und gehören zum entarteten Eigenwert 0,

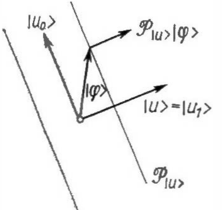


Fig. 43. Zum Eigenwertproblem eines Projektionsoperators $\mathscr{P}_{|u\rangle}$

$$\Lambda = 0, \quad \langle u \,|\, u_0^\mu\rangle = 0 \tag{33}$$

(Fig. 43). In einem $\mathfrak{U}_n$ spannen also die $(n-1)$ unabhängigen Vektoren $|u_0^\mu\rangle$ den $\mathfrak{u}_{n-1}$ auf, der senkrecht zu $|u\rangle$ ist.

Die Projektionsoperatoren $\mathscr{P}_{|v_k\rangle}$, die auf die Basisvektoren eines unitären Raumes projizieren, haben also diese Basisvektoren als Eigenvektoren,

$$\mathscr{P}_{|v_k\rangle}\,|v_{k'}\rangle = \delta(k,k')\,|v_{k'}\rangle. \tag{34}$$

Wie die Schreibweise schon andeutet, bleibt diese Gleichung auch für DIRAC-Vektoren richtig, wenn man für die Eigenwerte $\delta(k, k')$ die DIRACsche δ-Funktion $\delta(k - k')$ setzt.

§ 7. Das Eigenwertproblem transformierter Operatoren

Wir untersuchen die Eigenwertgleichung der Operatoren $\mathscr{L}'$, die aus $\mathscr{L}$ durch

$$\mathscr{L}' = \mathscr{A}\,\mathscr{L}\,\mathscr{A}^{-1} \tag{35}$$

entstehen (2.2 § 4a). Dazu denken wir uns das Eigenwertproblem von $\mathscr{L}$

$$\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle$$

bereits gelöst und bilden die Vektoren $|\mathscr{A}\,u_\Lambda\rangle$. Wenden wir auf diese den Operator $\mathscr{L}'$ an, so ergibt sich

$$\mathscr{L}'\,|\mathscr{A}\,u_\Lambda\rangle = \mathscr{A}\,\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|\mathscr{A}\,u_\Lambda\rangle, \tag{36}$$

d. h., $|\mathscr{A}\,u_\Lambda\rangle$ *ist Eigenvektor von* $\mathscr{L}'$ *zum Eigenwert* Λ. $\mathscr{L}$ *und* $\mathscr{L}'$ *haben dieselben Eigenwerte.*

Ist insbesondere der transformierende Operator $\mathscr{A}$ *unitär*, so sind mit der Orthonormierung der Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ von $\mathscr{L}$ auch die Eigenvektoren $|\mathscr{A}\,u_\Lambda\rangle$ von $\mathscr{L}'$ *orthonormiert*, weil Skalarprodukte bei unitären Transformationen invariant bleiben [Gl. (2.2–48)],

$$\langle\mathscr{A}\,u_\Lambda\,|\,\mathscr{A}\,u_{\Lambda'}\rangle = \langle u_\Lambda\,|\,u_{\Lambda'}\rangle = \delta(\Lambda,\Lambda'). \tag{37}$$

§ 8. Differentiation der Eigenwertgleichung nach einem Parameter

Hängt der Operator $\mathscr{L}$ von einem Parameter t — z. B. der Zeit — kontinuierlich ab, so werden seine Eigenwerte und Eigenvektoren ebenfalls Funktionen

dieses Parameters. Durch Differentiation [vgl. Gl. (2.2–11 a)] der Eigenwertgleichung

$$\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle$$

nach dem Parameter erhält man

$$\dot{\mathscr{L}}\,|u_\Lambda\rangle + \mathscr{L}\,|\dot{u}_\Lambda\rangle = \dot{\Lambda}\,|u_\Lambda\rangle + \Lambda\,|\dot{u}_\Lambda\rangle \tag{38}$$

oder nach Multiplikation mit $\langle u_{\Lambda'}|$

$$\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{\mathscr{L}}\,u_\Lambda\rangle + \langle u_{\Lambda'}\,|\,\mathscr{L}\,\dot{u}_\Lambda\rangle = \dot{\Lambda}\,\delta(\Lambda',\Lambda) + \Lambda\,\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{u}_\Lambda\rangle .$$

Setzen wir voraus, daß $\mathscr{L}$ HERMITEsch ist, so läßt sich für den zweiten Term auch schreiben

$$\langle u_{\Lambda'}\,|\,\mathscr{L}\,\dot{u}_\Lambda\rangle = \langle \mathscr{L}\,u_{\Lambda'}\,|\,\dot{u}_\Lambda\rangle = \Lambda'\,\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{u}_\Lambda\rangle,$$

und man erhält

$$\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{\mathscr{L}}\,u_\Lambda\rangle - \dot{\Lambda}\,\delta(\Lambda',\Lambda) = (\Lambda - \Lambda')\,\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{u}_\Lambda\rangle . \tag{39}$$

Hieraus ergibt sich für $\Lambda \neq \Lambda'$

$$\langle u_{\Lambda'}\,|\,\dot{u}_\Lambda\rangle = -\frac{\langle u_{\Lambda'}|\,\dot{\mathscr{L}}\,u_\Lambda\rangle}{\Lambda' - \Lambda}, \tag{40}$$

wodurch die Komponenten von $|\dot{u}_\Lambda\rangle$ in der Basis $|u_\Lambda\rangle$ festgelegt werden. Setzt man in Gl. (39) $\Lambda = \Lambda'$, so erhält man, unter der Voraussetzung, daß diskrete Eigenwerte vorliegen,

$$\dot{\Lambda} = \langle u_\Lambda\,|\,\dot{\mathscr{L}}\,u_\Lambda\rangle, \tag{41}$$

also die Veränderung des Eigenwertes $\Lambda(t)$.

Viertes Kapitel[1])

Der Produktraum

Bei vielen physikalischen Problemen besteht das betrachtete System aus Teilsystemen, zwischen denen eine Wechselwirkung herrscht. Um die bereits vorhandenen Kenntnisse über die Teilsysteme ausnützen zu können, ist es für die quantentheoretische Beschreibung häufig *zweckmäßig*, von den unitären Räumen $\mathfrak{U}^1, \mathfrak{U}^2, \ldots$ der unabhängigen Teilsysteme (1), (2), ... auszugehen und aus diesen den unitären Raum $\mathfrak{U}$ des zusammengesetzten Systems, das auch Wechselwirkungen zwischen (1), (2), ... umfaßt, aufzubauen (3.4 § 3).

§ 1. Die Vektoren des Produktraumes

Wir greifen aus den Vektoren zweier verschiedener, unitärer Räume $\mathfrak{U}^1$ und $\mathfrak{U}^2$ je einen Vektor $|\varphi^1\rangle$ und $|\varphi^2\rangle$ heraus und bilden aus ihnen formal ein Pro-

[1]) Die Kenntnis dieses Kapitels wird erst ab Kap. 3.4 erforderlich.

dukt (kein Skalarprodukt!), das kommutativ sein soll, und für das wir schreiben

$$\boxed{|\varphi^1\varphi^2\rangle \equiv |\varphi^1\rangle\,|\varphi^2\rangle = |\varphi^2\rangle\,|\varphi^1\rangle}\,. \tag{1}$$

Dieses Produkt, auch *direktes Produkt* genannt, soll wieder ein *Vektor* sein, d. h. die Rechenregeln eines unitären Raumes (Kap. 2.1) erfüllen. Die Vektoren $|\varphi^1\varphi^2\rangle$ liegen aber *nicht* in $\mathfrak{U}^1$ oder $\mathfrak{U}^2$, es wird vielmehr durch sie ein neuer Raum, der sogenannte *Produktraum*

$$\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \tag{2}$$

definiert: Er besteht aus allen Vektoren (1) und ihren Linearkombinationen mit komplexen Koeffizienten.[1]

Aus der Distributivität $|\varphi^1\rangle = a\,|u^1\rangle + b\,|v^1\rangle$ in $\mathfrak{U}^1$ soll folgen

$$|\varphi^1\varphi^2\rangle = a\,|u^1\varphi^2\rangle + b\,|v^1\varphi^2\rangle.$$

Entsprechendes soll sich aus der Distributivität in $\mathfrak{U}^2$ ergeben.

Unter dem *Skalarprodukt* zwischen zwei Vektoren $|\varphi^1\varphi^2\rangle$ und $|\chi^1\chi^2\rangle$,

$$\boxed{\langle\varphi^1\varphi^2\,|\,\chi^1\chi^2\rangle = \langle\varphi^1\,|\,\chi^1\rangle\,\langle\varphi^2\,|\,\chi^2\rangle}\,, \tag{3}$$

verstehen wir das Produkt der Skalarprodukte in den Räumen $\mathfrak{U}^1$ und $\mathfrak{U}^2$.

Sind $|v_k^1\rangle$ Basisvektoren in $\mathfrak{U}^1$ und $|v_l^2\rangle$ solche in $\mathfrak{U}^2$, so sind $|v_k^1v_l^2\rangle$ Basisvektoren in $\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ (sie spannen $\mathfrak{U}$ auf). Im Produktraum numerieren also die Index*paare* k, l die Komponenten eines Vektors. Haben die Räume $\mathfrak{U}^1$ bzw. $\mathfrak{U}^2$ die Dimensionen n^1 bzw. n^2, so ist also $n^1 n^2$ die Dimension von $\mathfrak{U}$; z. B., ist der Produktraum zweier zweidimensionaler Räume vierdimensional, seine Basisvektoren lauten $|v_1^1v_1^2\rangle$, $|v_1^1v_2^2\rangle$, $|v_2^1v_1^2\rangle$, $|v_2^1v_2^2\rangle$. Neben endlich-dimensionalen Räumen wollen wir aber auch unendlich-dimensionale mit in die Betrachtung einschließen. — Aus der Orthonormierung der Basisvektoren $|v_k^1\rangle$ und $|v_l^2\rangle$ in $\mathfrak{U}^1$ bzw. $\mathfrak{U}^2$ folgt nach Gl. (3) die der $|v_k^1v_l^2\rangle$,

$$\boxed{\langle v_k^1v_l^2\,|\,v_{k'}^1v_{l'}^2\rangle = \delta(k,k')\,\delta(l,l')}\,. \tag{4}$$

Mit der Vollständigkeit der Basisvektoren $|v_k^1\rangle$ und $|v_l^2\rangle$ von $\mathfrak{U}^1$ und $\mathfrak{U}^2$ sind die $|v_k^1v_l^2\rangle$ definitionsgemäß vollständig in $\mathfrak{U}$,

$$\boxed{\mathop{\mathrlap{\int}\sum}_k \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_l |v_k^1v_l^2\rangle\,\langle v_k^1v_l^2\,|\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}l = \mathbf{1}}\,. \tag{5}$$

Ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle$ aus $\mathfrak{U}$ (der nicht die Struktur $|\varphi^1\varphi^2\rangle$ besitzen muß!) hat also die Zerlegung

$$\boxed{|\varphi\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_k \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_l |v_k^1v_l^2\rangle\,\varphi(k,l)\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}l}\,, \tag{6}$$

[1]) Es sind also nicht alle Vektoren aus $\mathfrak{U}^1\times\mathfrak{U}^2$ ein bloßes direktes Produkt $|\varphi^1\rangle\,|\varphi^2\rangle$. Gerade hierin liegt die Ursache, daß in $\mathfrak{U}^1\times\mathfrak{U}^2$ auch Wechselwirkungen zwischen den physikalischen Systemen (1) und (2) erfaßt werden können.

seine Komponenten sind eine *Funktion der Veränderlichen* k und l[1]),

$$\varphi(k, l) = \langle v_k^1 v_l^2 \mid \varphi\rangle. \tag{7}$$

Ist $|\varphi\rangle$ speziell ein direktes Produkt $|\varphi^1\varphi^2\rangle$, so ergibt Gl. (3), daß seine Komponenten

$$\varphi(k, l) = \langle v_k^1 \mid \varphi^1\rangle \langle v_l^2 \mid \varphi^2\rangle = \varphi^1(k)\, \varphi^2(l) \tag{8}$$

die Produkte der Komponenten von $|\varphi^1\rangle$ und $|\varphi^2\rangle$ aus $\mathfrak{U}^1$ bzw. $\mathfrak{U}^2$ sind.

Die in 2.1 § 6 für einen beliebigen unitären Raum erläuterte *unitäre Basistransformation* kann man natürlich auch im direkten Produktraum ausführen. Es ist dabei möglich, zu Basisvektoren überzugehen, die *nicht* mehr direkte Produkte sind!

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die Konstruktion eines Produktraumes

$$\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \times \cdots \mathfrak{U}^N \tag{9}$$

aus mehreren Räumen $\mathfrak{U}^1, \mathfrak{U}^2, \ldots, \mathfrak{U}^N$ in völlig analoger Weise mittels der Vektoren

$$|\varphi^1\varphi^2 \cdots \varphi^N\rangle \equiv |\varphi^1\rangle\, |\varphi^2\rangle \cdots |\varphi^N\rangle \tag{10}$$

— in denen es wieder nicht auf die Reihenfolge ankomme — möglich ist. Da diese Erweiterung keinerlei Problematik bietet, wollen wir auf das Anschreiben der entsprechenden Formeln verzichten.

§ 2. Operatoren im direkten Produktraum

Alle in Kap. 2.2 u. 2.3 angestellten Überlegungen über die Operatoren in einem unitären Raum gelten natürlich auch im Produktraum.

Bildet man die Matrixelemente speziell mit den direkten Produkt-Basisvektoren $|v_k^1 v_l^2\rangle$, so werden sie durch die doppelte Indizierung [bzw. im Fall (9) durch die N Indizes] lediglich etwas umfangreicher. So numeriert in

$$L(k, l; k', l') = \langle v_k^1 v_l^2 \mid \mathscr{L}\, v_{k'}^1 v_{l'}^2\rangle \tag{11}$$

das Indexpaar k, l die Zeilen und k', l' die Spalten der Matrix. Die durch den Operator $\mathscr{L}$ vermittelte Vektorzuordnung $|\varphi\rangle \to |\mathscr{L}\varphi\rangle$ lautet daher in den Komponenten (7)

$$\varphi(k, l) \;\to\; \mathscr{L}\varphi(k, l) = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k'} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{l'} L(k, l; k', l')\, \varphi(k', l')\, \mathrm{d}k'\, \mathrm{d}l'. \tag{12}$$

Ein Operator $\mathscr{L}^1$, der zunächst nur im Raum $\mathfrak{U}^1$ definiert ist,

$$\mathscr{L}^1\, |\varphi^1\rangle = |\chi^1\rangle,$$

---

[1]) Wenn k und l bereits repräsentativ für mehrere Variable $k_1, k_2, \ldots$ und $l_1, l_2, \ldots$ stehen, so ist $\varphi(k_1, k_2, \ldots, l_1, l_2, \ldots) = \langle v^1_{k_1 k_2 \ldots}\, v^2_{l_1 l_2 \ldots} \mid \varphi\rangle$.

soll im Produktraum $\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ die Wirkung

$$\boxed{\mathscr{L}^1 \, |\varphi^1\varphi^2\rangle = |\chi^1\varphi^2\rangle} \tag{13}$$

besitzen. Manchmal schreibt man für den Operator $\mathscr{L}^1$, wenn er in $\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ angewendet wird, auch

$$\mathscr{L}^1 \times \mathbb{1}, \tag{14}$$

was gerade die Wirkung (13) zum Ausdruck bringen soll. (Das Zeichen $\times$ ist nicht mit dem Vektorproduktsymbol zu verwechseln!). — Entsprechend gilt für einen Operator $\mathscr{M}^2$ aus $\mathfrak{U}^2$ in $\mathfrak{U}$ $(\mathbb{1} \times \mathscr{M}^2)$,

$$\mathscr{M}^2 \, |\varphi^1\varphi^2\rangle = |\varphi^1\chi^2\rangle. \tag{15}$$

Für die Matrixelemente (11) von $\mathscr{L}^1$ ergibt Gl. (13)

$$L^1(k, l; k', l') = L^1(k, k') \, \delta(l, l'). \tag{16}$$

In Gl. (12) eingesetzt, heißt dies, daß durch $\mathscr{L}^1$ nur bezüglich der Variablen k eine Veränderung bewirkt wird

$$\mathscr{L}^1 \varphi(k, l) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} L^1(k, k') \, \varphi(k', l) \, \mathrm{d}k'. \tag{17}$$

Aus Gl. (13) und (15) ist ersichtlich, daß das *Produkt* $\mathscr{L}^1\mathscr{M}^2$ irgend zweier Operatoren aus den Räumen $\mathfrak{U}^1$ und $\mathfrak{U}^2$ *un*abhängig von der Reihenfolge ist.[1]) *Es kommutiert also jeder Operator* $\mathscr{L}^1$ *mit jedem Operator* $\mathscr{M}^2$,

$$\boxed{[\mathscr{L}^1, \mathscr{M}^2] = \mathscr{O}}\,. \tag{18}$$

Für die Matrixelemente des Produkts $\mathscr{L}^1\mathscr{M}^2$ ergibt sich in einer direkten Produktbasis nach Gl. (13) und (16)

$$\langle v_k^1 v_l^2 \,|\, \mathscr{L}^1\mathscr{M}^2 \, v_{k'}^1 v_{l'}^2\rangle \equiv (L^1 \times M^2)(k, l; k', l') = L^1(k, k') \, M^2(l, l') \tag{19}$$

(„*Produktmatrix*").

Hat ein Operator $\mathscr{L}^1$ im Raum $\mathfrak{U}^1$ die Eigenvektoren $|u_\Lambda^1\rangle$, so sind seine Eigenvektoren im direkten Produktraum $\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ wegen der Vertauschbarkeit mit allen Operatoren $\mathscr{L}^2$ aus $\mathfrak{U}^2$ die Linearkombination

$$|u_\Lambda^1\rangle \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{l} c_l \, |v_l^2\rangle \, \mathrm{d}l = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{l} c_l \, |u_\Lambda^1 v_l^2\rangle \, \mathrm{d}l. \tag{20}$$

Ist der Eigenwert Λ von $\mathscr{L}^1$ in $\mathfrak{U}^1$ t_Λ-fach, so wird dieser in $\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ also $(t_\Lambda n_2)$-fach.

Aufg. 53: Man gebe für eine Funktion $\varphi(k, l)$ die Entwicklung nach einem vollständigen Satz von Produktfunktionen $\chi_a^1(k) \, \chi_b^2(l)$ an.

Aufg. 54: Man schreibe die Produktmatrix (19) explizit für den Fall an, daß L^1 und M^2 zweidimensionale Matrizen sind.

---

[1]) In der Nomenklatur (14) schreibt man dafür

$$(\mathscr{L}^1 \times \mathbb{1}) \, (\mathbb{1} \times \mathscr{M}^2) = \mathscr{L}^1 \times \mathscr{M}^2.$$

DRITTER TEIL

Formulierung und Interpretation der Quantentheorie

Vorbemerkung

Im ersten Kapitel wird eine Einführung in die Grundgedanken der Quantentheorie gegeben, die dann in den weiteren Kapiteln ihre mathematische Formulierung erfährt. Die Kenntnis des im 2. Teil entwickelten Kalküls des unitären Vektorraums ist hierfür unerläßliche Voraussetzung.

Erstes Kapitel

Das Konzept der Quantentheorie

§ 1. Die Interpretation mikroskopischer Eigenschaften

Der Versuch, mit einer rein feldtheoretischen Beschreibung atomarer Vorgänge auszukommen, mißglückt, weil die Teilcheneigenschaften im Wellenbild nicht in widerspruchsfreier Weise untergebracht werden können. Dasselbe gilt mutatis mutandis für die der Mechanik zugrunde liegende Partikelvorstellung.

Eine gleichzeitige Verwendung von Teilchen- und Wellenbild wird aber durch die Experimente (Kap. 1.1) eigentlich gar nicht gefordert. Es ist vielmehr so, daß sich z. B. Elektronen nur bei bestimmten Versuchsbedingungen wie Teilchen (etwa mit einem bestimmten Ort) verhalten, während sie sich bei anderen Versuchsbedingungen wie Wellen (etwa mit einer bestimmten Wellenlänge) äußern. Die Materie — und ebenso die Strahlung — besteht also nicht gleichzeitig aus Wellen und Korpuskeln, sondern sie besitzt je nach den Versuchsbedingungen *entweder* Wellen- *oder* Korpuskeleigenschaften. Hierin liegt nun gerade die Möglichkeit, den gordischen Knoten des Dualismus zu zerschlagen und zu einer in sich konsistenten Beschreibung des atomaren Geschehens zu gelangen.

Die Begriffe der Mechanik bzw. Feldtheorie sind entstanden aus der unmittelbaren Anschauung des Alltags (z. B. aus der Bewegung eines Steines bzw. der Ausbreitung von Wasserwellen) und sind daher sicher zweckmäßig für die Beschreibung makroskopischer Phänomene. Wenn nun die Experimente mit mikroskopischen Objekten zeigen, daß sich unter bestimmten Versuchsbedingungen ein Teilchencharakter und bei anderen ein Wellencharakter manifestiert, so heißt dies, daß die unserer makroskopischen Anschauung entstammenden

Begriffe des Teilchen- bzw. Wellenbildes nicht ohne weiteres auf mikroskopische Phänomene übertragen werden können. Da wir für atomare Vorgänge keine direkte Anschauung besitzen, könnte man daher meinen, daß es ein aussichtsloses Unterfangen ist, dafür eine widerspruchsfreie Theorie zu gewinnen. Es ist jedoch möglich, die in den Experimenten sich äußernden Wirkungen der mikroskopischen Objekte widerspruchsfrei zu behandeln, wenn man darauf verzichtet, Begriffe für den Mikrokosmos *selbst* zu finden. *Wenn man von einer bestimmten, sich in einem Experiment zeigenden Eigenschaft spricht* (etwa vom Ort eines Elektrons), *so bedeutet dies nur, daß sich das mikroskopische Objekt in diesem Versuch so verhält, als ob es ein makroskopisches Objekt mit dieser Eigenschaft wäre.*[1]) In dieser Interpretation ist es verständlich, daß sich die aus der Dualität ergebenden scheinbaren Widersprüche auflösen, weil eben das mikroskopische Objekt nicht mit den jeweils gemessenen Eigenschaften selbst behaftet ist, sondern weil die sich zeigenden Eigenschaften von den Versuchsbedingungen abhängen. Elektronen sind — ebenso wie Photonen — also *weder Teilchen noch Wellen*, sondern sie verhalten sich bei bestimmten Experimenten so, als ob sie makroskopische Teilchen wären, während sie sich in anderen Versuchsanordnungen wie makroskopische Wellen äußern. Jede darüber hinausgehende Frage nach der Natur des Elektrons „an sich", d. h. unabhängig von der Meßapparatur, ist experimentell nicht entscheidbar und daher physikalisch sinnlos. Dasselbe gilt für alle anderen mikroskopischen Formen der Materie, wie Protonen, Neutronen, Atome und Moleküle.

§ 2. Der Einfluß der Meßapparatur

Die Feststellung einer bestimmten physikalischen Eigenschaft eines Systems bedeutet die Ausführung einer *Messung* mit einer Apparatur, d. h. mit einer bezüglich dieser Eigenschaft geeignet präparierten Anordnung (z. B. Zählrohr, Photoplatte o. ä.). Durch eine Wechselwirkung zwischen Meßobjekt und Meßapparatur wird die Messung vollzogen. Bei makroskopischen Meßobjekten ist der Einfluß der Wechselwirkung auf das Meßobjekt kontrollierbar und kann im Prinzip so klein gemacht werden, daß der Einfluß der Messung auf die Bewegung des Objekts vernachlässigt werden kann. Zum Beispiel läßt sich der Ort eines Planeten dadurch feststellen, daß man das vom Planeten gestreute Licht mittels eines Fernrohrs beobachtet. Der bei der Streuung der Lichtquanten an den Planeten abgegebene Impuls ist so klein, daß die Bewegung des Planeten nicht merklich verändert wird. Man kann also von der Meßapparatur und ihrer Wechselwirkung mit dem Meßobjekt völlig abstrahieren.

Bei der Messung einer Eigenschaft an einem mikroskopischen System hingegen erleidet dieses durch die Wechselwirkung mit der notwendigerweise makroskopischen Meßapparatur verhältnismäßig große, z. T. unkontrollierbare Veränderungen. Man kann zwar nach Ausführung der Messung behaupten, daß

[1]) Wenn wir dennoch häufig der Kürze halber „von einer Eigenschaft des mikroskopischen Systems" sprechen, so ist dies stets in dieser Interpretation zu verstehen.

das Meßobjekt die durch die Meßapparatur angezeigte Eigenschaft besitzt (bzw. im obigen Sinn genauer: daß es sich unmittelbar nach dieser Messung wie ein makroskopisches System mit dieser Eigenschaft verhält), aber der Einfluß der Messung ist so stark, daß dadurch die in früheren Messungen gewonnenen Eigenschaften mehr oder weniger zunichte gemacht werden. *Bei der Messung an mikroskopischen Objekten ist es also prinzipiell nicht möglich, vom Einfluß der Meßapparatur zu abstrahieren.* Eine beobachtete Größe resultiert aus einer Beziehung zwischen Objekt und Meßapparatur. Mit dem Begriff einer physikalischen Größe (Observable) ist also letztlich stets eine diese Größe messende Apparatur verknüpft.

§ 3. Die Unschärferelationen

Der Umstand, daß die Messung einer physikalischen Größe die durch frühere Messungen gewonnenen Kenntnisse anderer Größen illusorisch machen kann, bedeutet, *daß für die gleichzeitige Bestimmung gewisser Größen eine endliche Genauigkeitsgrenze existiert, die nicht unterschritten werden kann.* Während die klassische Mechanik gerade darauf fundiert ist, daß z. B. die Größen von Ort und Impuls eines Teilchens gleichzeitig durch eine Messung bestimmt werden

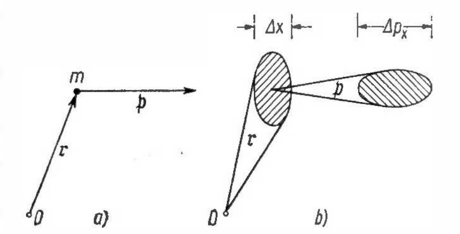


Fig. 44. a) Ort und Impuls in der klassischen Mechanik; b) Ort und Impuls im Rahmen der Unschärferelation: Liegt der Endpunkt des Ortsvektors $\mathfrak{r}$ irgendwo im ⫽-Bereich, so kann der Endpunkt des Impulsvektors $\mathfrak{p}$ nicht genauer bestimmt werden, als der ⧵⧵-Bereich angibt. (Der „Angriffspunkt" der $\mathfrak{p}$ Vektoren ist willkürlich in die Mitte des $\mathfrak{r}$-Bereichs gelegt)

können, so daß eine eindeutige Beschreibung der Bewegung möglich wird, ist eine solche *gleichzeitige*, beliebig genaue Messung dieser Größen am mikroskopischen Objekt nach der *Unschärferelation* (1.1 § 5a)

$$\Delta p_x \, \Delta x \geqq \hbar/2$$

nicht möglich (Fig. 44). Sie verlangt, daß im Rahmen der Unschärfe einer x-Messung die der p_x-Messung vorgeschrieben ist; d. h., *die Genauigkeit der Impulsmessung kann nicht gesteigert werden, sofern man nicht gleichzeitig eine Verringerung der Ortskenntnis in Kauf nehmen will.* Es ist also unmöglich, eine Meßapparatur zu konstruieren, die es erlaubt, von einem Elektron Ort und Impuls gleichzeitig beliebig scharf zu messen.

Die Unschärferelationen geben die Grenzen an, bis zu denen die Größen der klassischen Physik gleichzeitig angewendet werden können. Jeder über diese

Grenzen hinausgehende, gleichzeitige Gebrauch von Größen der klassischen Physik führt auf Widersprüche mit den Experimenten und ist daher physikalisch sinnlos.

§ 4. Der Spaltversuch. Wahrscheinlichkeitsaussagen

Für das Verständnis der Quantentheorie ist es zweckmäßig, ein Experiment noch einmal genauer zu analysieren, in dem nach der klassischen Vorstellung die Dualität zwischen Teilchen und Welle zum Ausdruck kommt. Wir werden dabei das *statistische Verhalten* der Meßergebnisse kennenlernen, das für die Formulierung der Quantentheorie wesentlich ist. Als Experiment dient die Interferenz von Elektronen oder Neutronen an den Atomen eines Kristalls (1.1 § 4a). Zur Vereinfachung der Verhältnisse setzen wir aber statt des Kristalls einen *Doppelspalt* (Fig. 45). Verwendet man statt Elektronen Licht, so haben wir gerade eine optische Beugungsanordnung vor uns.

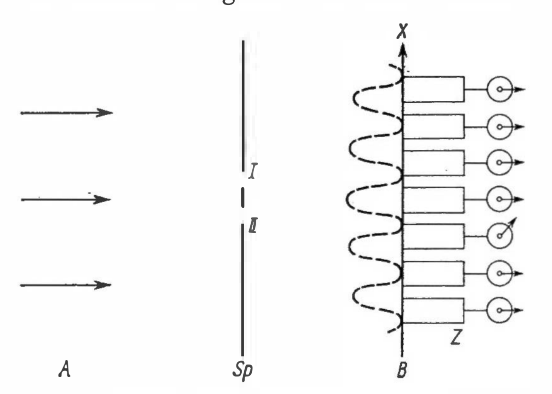


Fig. 45. Zum Doppelspaltversuch

Lassen wir einen Elektronenstrahl von links (A) auf den Kristall bzw. Doppelspalt Sp auftreffen, so ergibt sich auf einem Schirm B rechts vom Spalt die aus der Optik bekannte Interferenzerscheinung. Nun verringern wir die Intensität der einfallenden Strahlen so stark, daß nur mehr *ein* Teilchen einfällt. Dies kann man z. B. dadurch nachweisen, daß man vor dem Spalt an der Stelle A eine WILSON-Kammer aufstellt und in ihr die Bahn dieses Teilchens im Rahmen der Unschärferelation findet. Um nun feststellen zu können, an welcher Stelle x (von B) sich das Teilchen nach Durchlaufen des Spaltes befindet, stellen wir in B längs x eine Reihe von Zählrohren Z (in Koinzidenzschaltung mit A) auf. Führt man dieses Experiment durch, so ergibt sich, daß genau *ein* Zählrohr anspricht. Die Interferenzfigur ist also bei Verwendung eines Elektrons im Rahmen dieser Ortsmessung nicht vorhanden.

Führt man das Experiment mit einem einzigen Teilchen *unter denselben Anfangsbedingungen* öfters hintereinander aus, so ergibt sich, daß von den Zählrohren in B *keineswegs immer dasselbe anspricht*. Trägt man die Ansprechrate der einzelnen Zählrohre bei vielen solchen Versuchen über x auf, so stellt man fest, daß die Häufigkeitsverteilung der x-Messungen gerade mit dem Interferenzbild der Wellenvorstellung übereinstimmt.

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik läßt sich also aus den Anfangsbedingungen A das Verhalten des einzelnen Elektrons bei späteren Messungen B nicht

in determinierter Weise vorhersagen. *Man kann nur Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang von Messungen machen. Das einzelne* (!) *mikroskopische Objekt zeigt ein statistisches Verhalten bezüglich der Observablen.*

Würde man das Elektron als ein Teilchen auffassen, so könnte man sich bei dem Doppelspaltexperiment darüber wundern, daß die Häufigkeitsverteilung der x-Werte die des Doppelspaltes und nicht jene des einfachen Spaltes ist, da ja nach der Partikelvorstellung ein Teilchen nur entweder durch die Öffnung I oder durch die Öffnung II gehen kann. Das Experiment zeigt aber, daß das Elektron *sowohl* durch I *als auch* durch II geht. Im Rahmen des entwickelten Konzepts, wonach der Begriff „Ort" nicht dem Elektron an sich zugeordnet werden kann, sondern es stets einer geeigneten Meßapparatur bedarf, um vom Ort eines Elektrons sinnvoll sprechen zu können, ist dieses Verhalten keineswegs verwunderlich. Durch den Doppelspalt erfolgt nämlich (in der Spaltebene) nicht die Ortsmessung „entweder durch I oder durch II", sondern die weniger einschneidende Messung „sowohl durch I als auch durch II" (die im Wellenbild anschaulicher verständlich ist als im Teilchenbild). Würde man im Doppelspalt eine weitere Meßapparatur anbringen, die feststellt, daß das Elektron gerade durch die Öffnung I tritt, so würde diese einen solch starken Eingriff bedeuten, daß dadurch auch die Häufigkeitsverteilung in B verändert wird. Am einfachsten läßt sich eine solche Ortsmessung im Spalt dadurch vornehmen, daß man die Öffnung II schließt. Die Häufigkeitsverteilung in B stimmt dann mit der Beugungsfigur *eines* Spaltes überein.

Die Unschärferelationen zwischen Orts- und Impulskomponenten zeigen, daß die „Bewegung" eines Elektrons nicht durch eine Bahn im Sinne der klassischen Mechanik beschrieben werden kann. Das statistische Verhalten eines einzelnen Elektrons im Doppelspaltversuch legt es vielmehr nahe, an Stelle der Bahn eine „*Wahrscheinlichkeitsamplitude*" $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ für jeden Raumpunkt $\mathfrak{r}$ zur Zeit t aufzusuchen, *die es erlaubt, die Wahrscheinlichkeit für das Eintreffen eines Meßwertes einer Observablen* (repräsentiert durch eine bestimmte Meßapparatur) *zu berechnen*, z. B. im Doppelspaltversuch die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Elektron zur Zeit t ein Zählrohr an der Stelle x auf B auslöst. Da die Wahrscheinlichkeitsverteilung für eine Ortsmessung — wenigstens für *ein* Elektron — mit der Intensitätsverteilung $\varrho(\mathfrak{r}, t)$ übereinstimmt, die sich ergibt, wenn man nach der klassischen Feldtheorie [Schrödinger-Gleichung ohne elektromagnetische Selbstwechselwirkung (1.3–32)] Beugung und Interferenz am Doppelspalt berechnet, so kann man erwarten, *daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude* $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ *die* Schrödinger-*Gleichung erfüllt, so daß die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen des Elektrons im Volumelement* d^3x *am Ort* $\mathfrak{r}$ *zur Zeit* t *gegeben ist durch* $|\Phi(\mathfrak{r}, t)|^2 \, d^3x$. Aus der Tatsache, daß das klassische Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ und die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ für ein Elektron formal derselben Gleichung genügen, kann man natürlich nicht schließen, daß es sich um dieselben Größen handelt. *Sie sind begrifflich völlig verschieden!* Der Unterschied wird ganz besonders augenfällig bei der Behandlung mehrerer Elektronen, für die die Wahrschein-

lichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2, \ldots, t)$ allein deshalb nicht mehr mit dem klassischen Feld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ übereinstimmen kann, weil dieses nur von *einer* Ortsvariablen $\mathfrak{r}$ abhängt. Wie in diesem Fall die Differentialgleichung für $\Phi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2, \ldots, t)$ lautet, werden wir in 4.1 § 6 sehen.

Wegen des statistischen Verhaltens kann man für den Ausgang der Messung einer Observablen — *vor* Ausführung der Messung! — nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen. Hat jedoch die Messung stattgefunden, hat also z. B. ein Zählrohr den Ort eines Elektrons an einem Zählwerk fixiert, so geht durch den Meßprozeß die Wahrscheinlichkeit in die Sicherheit dafür über, daß die Observable den gemessenen Wert hat und keinen anderen. Ist der Meßprozeß zur Zeit t_0 beendet, so wird durch ihn die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t_0)$ festgelegt. *Der Eingriff durch den Meßprozeß liefert also für die Wahrscheinlichkeitsamplitude neue Anfangsbedingungen. Für spätere Zeiten $t > t_0$ wird die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ wieder durch die* SCHRÖDINGER-*Gleichung bestimmt, sie erlaubt Wahrscheinlichkeitsaussagen für den Ausgang der Messung einer Observablen zur Zeit t.*

In den folgenden Kapiteln soll die Quantentheorie in ihr mathematisches Kleid gebracht werden. Diese Aufgabe gliedert sich im wesentlichen in die drei Probleme:

1. Mathematische Beschreibung der physikalischen Observablen (Kap. 3.2).
2. Behandlung des statistischen Verhaltens bei der Messung der Observablen (Kap. 3.3).
3. Dynamik des quantenmechanischen Systems (Kap. 3.5).

Zweites Kapitel

Die Quantisierung

§ 1. Beschreibung der Observablen durch Hermitesche Operatoren

In der klassischen Physik werden die Meßwerte der verschiedenen Observablen gleichzeitig durch das betrachtete physikalische System realisiert, sie hängen funktionell voneinander ab. Zum Beispiel läßt sich das Ergebnis einer Drehimpulsmessung aus den Meßwerten von Ort und Impuls bestimmen, weil die Apparatur der Drehimpulsmessung das Meßobjekt praktisch nicht stört. Bei der Messung an mikroskopischen Objekten hingegen ist eine solche Abstraktion von der Meßapparatur prinzipiell nicht mehr möglich. Man ist nicht imstande, irgendwelche Observable des physikalischen Systems gleichzeitig zu messen. *Nur den Meßwert derjenigen Observablen, die man gerade gemessen hat, kann man dem mikroskopischen Objekt zuordnen.* Die Meßwerte einer Observablen dürfen also i. allg. nicht aus den Meßwerten anderer Observabler berechenbar sein. Es gilt

einen mathematischen Kalkül zu entwickeln, der diesem Sachverhalt Rechnung trägt. Das bedeutet, daß die physikalischen Observablen in anderer Weise zu erfassen sind als in der klassischen Physik. *Quantentheoretisch ist also zwischen der Beschreibung der Observablen und der ihrer Meßwerte zu unterscheiden.*

Es hat sich gezeigt, daß *die Operatoren eines unitären Raumes* (Kap. 2.2) *für die quantentheoretische Beschreibung der Observablen die geeigneten mathematischen Gebilde sind.*[1]) Wie wir noch genauer sehen werden (3.3 § 8), erlaubt nämlich z. B. die im allgemeinen gegebene Nichtvertauschbarkeit zweier Operatoren die mathematische Erfassung der nicht beliebig scharfen, gleichzeitigen Meßbarkeit zweier Observabler wie Ort und Impuls.

Da es sich ferner erweisen wird (3.3 § 4), daß die Eigenwerte der Operatoren die möglichen Meßwerte der Observablen bedeuten, beschränkt man sich auf HERMITEsche Operatoren, weil deren Eigenwerte reell sind (2.3 § 2), wie man es von physikalischen Meßdaten verlangen muß.

Die Observablen der klassischen Physik — wie Energie, Impuls, Drehimpuls, Ort — sind über Erhaltungssätze definiert, die eine Folge bestimmter *Symmetrietransformationen* in Raum und Zeit sind (1.2 § 3 u. 1.7 § 4). Formuliert man diese Transformationen in der Sprache der Quantentheorie (Kap. 3.6), so wird man auf HERMITEsche Operatoren geführt, die bei Vorliegen der Symmetrie wieder die Eigenschaft von Erhaltungsgrößen besitzen. Da diese Operatoren also demselben allgemeinen Prinzip entspringen wie die klassischen Größen, ist es sinnvoll, sie als denselben physikalischen Begriff aufzufassen und diesen Operatoren Namen wie Energie, Impuls, Drehimpuls, Ort usw. zu geben. Auf diese Weise wird also der Zusammenhang zwischen den klassischen Größen und den quantentheoretischen vermittelt. Da in der Quantentheorie nicht nur kontinuierliche, sondern auch diskrete Symmetriegruppen zu Erhaltungssätzen führen, besitzt man quantentheoretisch eine größere Anzahl von Observablen als in der klassischen Physik, ein Beispiel dafür ist die „Parität" (3.6 § 3). Die Durchführung dieser Symmetrieüberlegungen erfordert jedoch bereits eine gewisse Vertrautheit mit der Quantentheorie, so daß wir sie auf später verschieben (Kap. 3.6) und zunächst einfach fordern:

Die Observablen L eines physikalischen Systems werden beschrieben durch HERMITE*sche Operatoren* $\mathscr{L} = \mathscr{L}^\dagger$ *in einem unitären Raum* $\mathfrak{U}$.[2]) Dieser unitäre Raum wird selbst durch die Struktur des speziell betrachteten, physikalischen Systems, d. h. durch die Relationen zwischen den Operatoren, bestimmt (Kap. 3.4).

---

[1]) Beim Übergang von der klassischen zur quantentheoretischen Behandlung werden also die Begriffe beibehalten, aber für ihre Beschreibung neue mathematische Größen, die Operatoren, eingeführt.

[2]) In einem zweidimensionalen, reellen Vektorraum könnte man sich die den physikalischen Observablen zugeordneten Operatoren einfach als Ellipsen vorstellen (Fig. 35, S. 131).

Die Observable „i-te kartesische Komponente des Ortsvektors" eines Elektrons wird also durch einen *Ortsoperator*

$$\mathscr{x}_i = \mathscr{x}_i^\dagger \tag{1}$$

beschrieben. Die Operatoren beziehen sich — ebenso wie die entsprechenden klassischen Größen — auf ein bestimmtes, vorgegebenes *Koordinatensystem.* Das Transformationsverhalten der Operatoren beim Übergang zu einem anderen Koordinatensystem besprechen wir in Kap. 3.6. Über die Probleme, die bei Operatoren von krummlinigen Komponenten entstehen, vgl. Fußnote [2]) S. 122.

Entsprechend werden die Komponenten des *Impulses* durch Operatoren

$$\mathscr{p}_i = \mathscr{p}_i^\dagger, \tag{2}$$

die des *Drehimpulses* durch

$$\ell_i = \ell_i^\dagger \tag{3}$$

dargestellt. Liegen N Elektronen vor, so läuft der Index i von 1 bis $3N$.

Eine der wichtigsten Observablen ist die *Energie*, sie wird durch den HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^\dagger \tag{4}$$

erfaßt.

Entsteht in der klassischen Interpretation eine Observable G durch (totale) zeitliche Differentiation aus einer Observablen L, so wird die Observable G quantentheoretisch durch einen Operator $\mathscr{G}$ beschrieben, der zunächst nichts mit dem Operator $\mathscr{L}$ zu tun hat, z. B.

$L =$ Ort x_i $\rightarrow$ $\mathscr{L} =$ Ortsoperator $\mathscr{x}_i$.

$G =$ Geschwindigkeit v_i $\rightarrow$ $\mathscr{G} =$ Geschwindigkeitsoperator $\mathscr{v}_i$.

Um die physikalische Bedeutung des Operators $\mathscr{G}$ besser zum Ausdruck zu bringen, schreiben wir $\mathring{\mathscr{L}}$ an Stelle von $\mathscr{G}$

$$\boxed{G \equiv \dot{L} \;\rightarrow\; \mathscr{G} \equiv \mathring{\mathscr{L}}}. \tag{5}$$

$\mathring{\mathscr{L}}$ ist also jener Operator, der die Observable „Zeitliche Veränderung der Observablen L" beschreibt. Er ist kein Differentialquotient des Operators $\mathscr{L}$. $\mathring{\mathscr{L}}$ ist lediglich eine andere Schreibweise für $\mathscr{G}$, z. B. schreiben wir für den Geschwindigkeitsoperator $\mathscr{v}_i \equiv \mathring{\mathscr{x}}_i$ oder für den Beschleunigungsoperator $\mathscr{b}_i \equiv \mathring{\mathscr{v}}_i \equiv \mathring{\mathring{\mathscr{x}}}_i$.

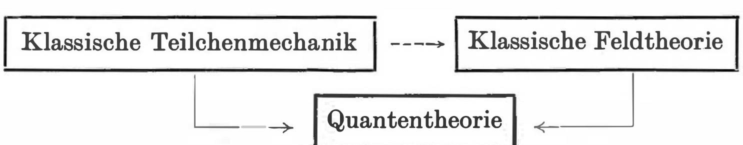
Neben den bekannten Observablen, wie Ort, Impuls oder Energie sind in der Quantentheorie noch andere Observable wichtig, denen man in der klassischen

Physik wegen ihrer fast trivialen Fragestellung kaum Aufmerksamkeit schenkt. Man kann nämlich durch eine Messung P_Λ entscheiden, ob von einer Observablen L ein vorgegebener Wert Λ eingenommen wird. Die Messung der Observablen P_Λ liefert also nur *Ja-Nein-Aussagen*, denen wir die Meßwerte 1 oder 0 zuordnen. Diese Observable wird quantentheoretisch durch den *Projektionsoperator* $\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} = |u_\Lambda\rangle\langle u_\Lambda|$ auf den zum Eigenwert Λ gehörigen Eigenvektor $|u_\Lambda\rangle$ des Operators $\mathscr{L}$ beschrieben, weil die Projektionsoperatoren den Eigenwert (= Meßwert!) 1 zum Eigenvektor $|u_\Lambda\rangle$ und 0 zu allen anderen Eigenvektoren besitzen (2.3 § 6).

Bei der Quantisierung eines *Feldes* werden die reellen Komponenten des klassischen Feldes ψ_i zu HERMITEschen Operatoren

$$\psi_i = \psi_i^\dagger . \tag{6}$$

Da die Observablen eines Feldes, wie Schwerpunkt, Gesamtimpuls, Gesamtdrehimpuls, Gesamtenergie durch die Feldamplituden gegeben sind (Kap. 1.4), werden durch die Quantisierung (6) auch die Feldobservablen zu (HERMITEsche) Operatoren. Wir werden in Kap. 4.6 auf die speziellen Fragen der Feldquantisierung (am Beispiel des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes) näher eingehen. Ausdrücklich sei an dieser Stelle jedoch darauf hingewiesen, daß die allgemeine Formulierung und Interpretation der Quantentheorie, die in diesem dritten Teil des Buches gegeben wird, für *alle* Observablen gilt, gleichgültig, ob sie dem klassischen Teilchenbild oder dem klassischen Feldbild entstammen. Wir werden sehen (Kap. 4.6), daß die Quantisierung der klassischen Teilchenvorstellung auf dieselben Aussagen führt wie die Quantisierung der klassischen Feldvorstellungen — jedenfalls wenn wir in beiden Fällen dieselbe, definierte Anzahl von Teilchen vorliegen haben.



Der mittlere, gestrichelte Pfeil symbolisiert die in Kap. 1.3 gegebene Herleitung der SCHRÖDINGERschen Materiefeldgleichung. Der linke Pfeil führt auf die „*Quantentheorie des Teilchenbildes*", der rechte auf die „*Quantenfeldtheorie*". *Die genannte Äquivalenz bedeutet, daß in der Tat das Problem der Dualität von Welle und Korpuskel in der Quantentheorie gelöst ist.*

§ 2. Die Vertauschungsrelationen

Man bedient sich in der Quantentheorie der Operatoren, weil sie nicht vertauschbar zu sein brauchen und es daher möglich ist, einen Kalkül zu entwickeln, der es automatisch verhindert, daß alle Observablen gleichzeitig scharf gemessen werden können. Es ist also wichtig zu wissen, ob zwei Operatoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$,

die bestimmten physikalischen Observablen zugeordnet sind, miteinander vertauschen oder nicht — genauer gesprochen, man muß angeben, welcher physikalischen Observablen $\mathcal{N}$ der Kommutator

$$\boxed{\mathrm{i}\,[\mathcal{L}, \mathcal{M}] \equiv \mathrm{i}\,(\mathcal{L}\mathcal{M} - \mathcal{M}\mathcal{L}) = \mathcal{N}} \tag{7}$$

zuzuordnen ist (der Faktor i ist notwendig, damit $\mathcal{N}$ wieder HERMITEsch ist). Diese spezifisch quantentheoretische Frage der *Vertauschungsrelationen* kann natürlich nicht durch rein klassische Überlegungen beantwortet werden.

Die Vertauschungsrelationen zwischen den Operatoren bilden die fundamentale Grundlage der gesamten Quantentheorie: Wie wir später noch genauer sehen werden (4. Teil), werden durch sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der Operatoren bestimmt und dadurch Aussagen über die Messung der Observablen ermöglicht. Gleichzeitig legen die Vertauschungsrelationen auch den für die quantentheoretische Beschreibung eines bestimmten physikalischen Systems notwendigen unitären Raum $\mathfrak{U}$, d. h. ein vollständiges System von Basisvektoren, fest (Kap. 3.4).

Die im § 1 erwähnte Definition der physikalischen Observablen über *Symmetrietransformationen* führt auf die Vertauschungsrelationen zwischen den Observablen. Aus dem dort genannten Grund wollen wir jedoch diese Überlegung auf Kap. 3.6 verschieben und hier die Ergebnisse vorwegnehmen. Zum Beispiel gelten für die HERMITEschen Operatoren der kartesischen Orts- und Impulsoperatoren die Vertauschungsrelationen

$$[\mathscr{x}_i, \mathscr{x}_k] = \mathcal{O} \tag{8}$$

$$[\mathscr{p}_i, \mathscr{p}_k] = \mathcal{O} \tag{9}$$

$$[\mathscr{p}_i, \mathscr{x}_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\delta_{ik}\,\mathit{1}\,. \tag{10}$$

Die verschiedenen Komponenten des Ortsoperators sind also alle untereinander vertauschbar. Dasselbe gilt für die Impulskomponenten. Die Komponenten von Ort und Impuls in derselben Richtung ($i = k$) hingegen vertauschen nicht, ihr Kommutator ist $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathit{1}$. Der Faktor $\hbar$ ist schon aus Dimensionsgründen erforderlich. Die Komponenten von Ort und Impuls in verschiedenen Richtungen ($i \neq k$) sind vertauschbar. Die Gl. (8) bis (10) gelten auch für die Komponenten von N Teilchen; die Indizes i und k laufen dann von 1 bis $3N$.

§ 3. Die Observablen als Operatorfunktionen

a) Übersetzung klassischer Funktionen

Die Observablen der klassischen Mechanik sind als Funktionen

$$F = F(x_1, \ldots, p_1, \ldots) \tag{11}$$

gegeben. Es erhebt sich die Frage, wie in der Quantentheorie der zugehörige HERMITEsche Operator $\mathscr{F}$ aus den Operatoren $\mathscr{x}_1, \ldots, \mathscr{p}_1, \ldots$ aufzubauen ist.[1]) Wegen der Nichtvertauschbarkeit der $\mathscr{x}_i$ und $\mathscr{p}_i$ erhält man diese Operatorfunktion

$$\mathscr{F} = \mathscr{F}(\mathscr{x}_1, \ldots, \mathscr{p}_1, \ldots) \tag{12}$$

im allgemeinen *nicht* einfach dadurch, daß man die Funktion (11) zwischen den Orts- und Impulsoperatoren anschreibt. Es bestehen bis heute sogar verschiedene Ansichten darüber, ob und wie man bei komplizierteren Funktionen (11) die zugehörigen Operatorfunktionen (12) eindeutig angeben kann.[2]) Die physikalisch interessierenden Observablen besitzen jedoch eine so einfache Abhängigkeit von Ort und Impuls, daß diese Probleme praktisch bedeutungslos sind.

Setzt sich klassisch die Observable F additiv aus einer reinen Orts- und Impulsfunktion zusammen, so verlangt man, daß der Operator $\mathscr{F}$ dieselbe Funktion in den Orts- und Impulsoperatoren ist,

$$\boxed{F = f(x_1, \ldots) + g(p_1, \ldots) \rightarrow \mathscr{F} = \mathscr{f}(\mathscr{x}_1, \ldots) + \mathscr{g}(\mathscr{p}_1, \ldots)}\,. \tag{13}$$

f, g und $\mathscr{f}$, $\mathscr{g}$ bedeuten also auf beiden Seiten die gleichen funktionellen Abhängigkeiten. Befindet sich etwa ein Teilchen unter dem Einfluß eines Potentials, so erhält man für seinen HAMILTON-Operator

$$\boxed{H = \frac{1}{2m}\sum_i p_i^2 + V(x_1, x_2, x_3) \rightarrow \mathscr{H} = \frac{1}{2m}\sum_i \mathscr{p}_i^2 + \mathscr{V}(\mathscr{x}_1, \mathscr{x}_2, \mathscr{x}_3)}\,,^{3)} \tag{14}$$

wobei der Operator $\mathscr{V}$ der potentiellen Energie genauso von den Ortsoperatoren abhängt wie im klassischen Fall V von den Ortskoordinaten. Entsprechendes gilt für mehrere Teilchen, zwischen denen eine ortsabhängige Wechselwirkung (z. B. COULOMB-Wechselwirkung) besteht.

Für Funktionen, die aus Produkten von Ort und Impuls aufgebaut sind, ist eine so einfache Übersetzung nicht mehr möglich. Betrachten wir z. B. die Funk-

---

[1]) Hat man eine Observable $\mathscr{F}$ als Operatorfunktion von Ort und Impuls vor sich, so ist zu beachten, daß die zugehörige Meßapparatur die Observable stets *als Ganzes* mißt. Es wäre völlig falsch zu glauben, daß man etwa durch ein Nacheinandermessen der in der Operatorfunktion enthaltenen Größen eine F-Messung ausführt, weil mikroskopisch eine zweite Messung das Meßergebnis der ersten zunichte machen kann. Zum Beispiel ist also eine Energiemessung nicht etwa dadurch zu bewerkstelligen, daß man zuerst die potentielle Energie und dann die kinetische Energie ausmißt.

[2]) Dies ist auch die Ursache, daß man sich in der Quantentheorie kaum der Methode der kanonischen Transformationen $X = X(x, p)$, $P = P(x, p)$ bedient, die in der klassischen Mechanik von so großem Nutzen ist.

[3]) In einer nicht-relativistischen Theorie ist die Masse m konstant und wird daher in der quantentheoretischen Behandlung durch eine c-Zahl (gewöhnliche, „klassische" Zahl) beschrieben.

tion $F = px$: Der Operator $\mathcal{p}\,\mathcal{x}$ ist wegen der Nichtvertauschbarkeit von Ort und Impuls nicht mehr HERMITEsch, aber man kann die HERMITEizität durch eine symmetrische Schreibweise erreichen und übersetzt daher

$$px \;\to\; \frac{1}{2}(\mathcal{p}\mathcal{x} + \mathcal{x}\mathcal{p}) = \mathcal{p}\mathcal{x} - \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\mathbf{1}. \tag{15}$$

Entsprechendes gilt für die Funktionen

$$\boxed{\begin{aligned} F &= \sum_i p_i f_i(x_1, \ldots) \;\to\; \mathcal{F} = \frac{1}{2}\sum_i \left(\mathcal{p}_i \mathcal{f}_i(\mathcal{x}_1, \ldots) + \mathcal{f}_i(\mathcal{x}_1, \ldots)\,\mathcal{p}_i\right) \\ F &= \sum_i x_i g_i(p_1, \ldots) \;\to\; \mathcal{F} = \frac{1}{2}\sum_i \left(\mathcal{x}_i \mathcal{g}_i(\mathcal{p}_1, \ldots) + \mathcal{g}_i(\mathcal{p}_1, \ldots)\,\mathcal{x}_i\right) \end{aligned}} \tag{16}$$

und für Linearkombinationen solcher Funktionstypen.

b) Die Berechnung von Kommutatoren

Aus den Vertauschungsrelationen (8) bis (10) der Orts- und Impulsoperatoren lassen sich mit Hilfe der Rechenregeln für Kommutatoren [Gl. (2.2–7)] die Vertauschungsrelationen einer Operatorfunktion

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathcal{x}_1, \ldots, \mathcal{p}_1, \ldots)$$

mit $\mathcal{x}_k$ und $\mathcal{p}_k$ herleiten. Zum Beispiel erhält man für $\mathcal{F} = \mathcal{x}^2$

$$[\mathcal{x}^2, \mathcal{x}] = [\mathcal{x}, \mathcal{x}]\,\mathcal{x} + \mathcal{x}\,[\mathcal{x}, \mathcal{x}] = \mathcal{O},$$

$$[\mathcal{x}^2, \mathcal{p}] = [\mathcal{x}, \mathcal{p}]\,\mathcal{x} + \mathcal{x}\,[\mathcal{x}, \mathcal{p}] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,2\mathcal{x}.$$

Für eine kompliziertere Funktion $\mathcal{F}$ ergibt sich der Kommutator durch Operatordifferentiation

$$\boxed{[\mathcal{F}, \mathcal{x}_k] = +\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{p}_k}} \tag{17}$$

$$\boxed{[\mathcal{F}, \mathcal{p}_k] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{x}_k}}\,. \tag{18}$$

Diese Gleichungen lassen sich zunächst für reine Orts- oder Impulsfunktionen $\mathcal{F}(\mathcal{x}_1, \ldots)$ bzw. $\mathcal{F}(\mathcal{p}_1, \ldots)$ beweisen, wobei die Differentialquotienten durch Gl. (2.2–11) definiert sind und die üblichen Regeln der Differentialrechnung erfüllen. Wir führen den Beweis durch Induktion: Gilt etwa die Gl. (17) für zwei Funktionen $\mathcal{F}_1(\mathcal{p}_1, \ldots)$ und $\mathcal{F}_2(\mathcal{p}_1, \ldots)$, so ist ihre Gültigkeit auch für $\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2$ und $\mathcal{F}_1\mathcal{F}_2$ gewährleistet; aus Gl. $(2.2\text{–}7_5)$ und $(2.2\text{–}7_6)$ folgt nämlich

$$\begin{aligned} [\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2, \mathcal{x}_k] &= [\mathcal{F}_1, \mathcal{x}_k] + [\mathcal{F}_2, \mathcal{x}_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial \mathcal{p}_k} + \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial \mathcal{p}_k}\right) \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial(\mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2)}{\partial \mathcal{p}_k} \end{aligned} \tag{19}$$

und

$$[\mathcal{F}_1 \mathcal{F}_2, x_k] = [\mathcal{F}_1, x_k] \mathcal{F}_2 + \mathcal{F}_1 [\mathcal{F}_2, x_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial p_k} \mathcal{F}_2 + \mathcal{F}_1 \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial p_k} \right)$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \mathcal{F}_1 \mathcal{F}_2}{\partial p_k}. \tag{20}$$

Weil die Gl. (17) für $\mathcal{F} = p_i$ auf Grund der Vertauschungsrelation (10) erfüllt ist, ist damit die Gültigkeit für jedes Polynom $\mathcal{F}(p_1, \ldots)$ nachgewiesen. Für beliebige Funktionen $\mathcal{F}(p_1, \ldots)$ und $\mathcal{F}(x_1, \ldots)$ kann man die Gl. (17) und (18) aus der Spektraldarstellung beweisen.

Auch in dem Fall, daß $\mathcal{F}$ eine Potenzreihe in den Orts- *und* Impulskoordinaten ist, lassen sich die Kommutatoren mittels Gl. (17) und (18) berechnen. Bei der Produktdifferentiation ist auf die *Reihenfolge* der Faktoren zu achten [Gl. (20)!]. Zum Beispiel ist

$$[x^m p^n, x] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial x^m p^n}{\partial p} = n \frac{\hbar}{\mathrm{i}} x^m p^{n-1}.$$

c) Beispiel: Der Drehimpuls

Die Operatoren der Komponenten des *Drehimpulses* eines Teilchens (ohne Spin) lauten

$$\begin{aligned} \ell_1 &= x_2 p_3 - x_3 p_2, \\ \ell_2 &= x_3 p_1 - x_1 p_3, \\ \ell_3 &= x_1 p_2 - x_2 p_1. \end{aligned} \tag{21}$$

Eine Symmetrisierung ist dabei unnötig, weil die Komponenten von Ort und Impuls mit verschiedenen Indizes vertauschbar sind.

Aus den Beziehungen (17) und (18) folgen unmittelbar die Vertauschungsrelationen

$$\boxed{\begin{aligned} &[\ell_i, x_i] = [\ell_i, p_i] = \mathcal{O} \\ &[\ell_1, x_2] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} x_3, \quad [\ell_1, x_3] = +\frac{\hbar}{\mathrm{i}} x_2, \ldots \\ &[\ell_1, p_2] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} p_3, \quad [\ell_1, p_3] = +\frac{\hbar}{\mathrm{i}} p_2, \ldots \end{aligned}}. \tag{22}$$

Die Punkte sollen die Gleichungen andeuten, die durch zyklische Vertauschung der Indizes entstehen. Für die Vertauschung der Drehimpulskomponenten unter-

einander erhalten wir hieraus

$$[\ell_1, \ell_2] = [x_2\, p_3, \ell_2] - [x_3\, p_2, \ell_2] = x_2 [p_3, \ell_2] - [x_3, \ell_2]\, p_2$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} (x_2\, p_1 - x_1\, p_2),$$

$$\boxed{[\ell_1, \ell_2] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \ell_3, \ldots} . \tag{23}$$

Im Gegensatz zu den Komponenten von Ort und Impuls sind also die des Drehimpulses *nicht untereinander vertauschbar.*

Der Operator des Drehimpulsquadrates, definiert durch

$$\vec{\ell}^{\,2} = \ell_1^2 + \ell_2^2 + \ell_3^2, \tag{24}$$

ist vertauschbar mit allen Komponenten ℓ_i

$$\boxed{\left[\vec{\ell}^{\,2}, \ell_i\right] = \mathcal{O}} ; \tag{25}$$

denn es gilt z. B.

$$\left[\vec{\ell}^{\,2}, \ell_1\right] = [\ell_2^2, \ell_1] + [\ell_3^2, \ell_1] = [\ell_2, \ell_1]\ell_2 + \ell_2[\ell_2, \ell_1] + [\ell_3, \ell_1]\ell_3 + \ell_3[\ell_3, \ell_1]$$
$$= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} (\ell_3\ell_2 + \ell_2\ell_3 - \ell_2\ell_3 - \ell_3\ell_2) = \mathcal{O}.$$

d) Vektoroperatoren

Es ist üblich, die Operatoren der Komponenten eines Vektors durch Hinzufügen der gewöhnlichen (kartesischen) Einheitsvektoren $\mathfrak{e}_i$ zu einem „*Vektoroperator*" zusammenzufassen, z. B.

$$\vec{x} = \sum_i x_i\, \mathfrak{e}_i, \quad \vec{p} = \sum_i p_i\, \mathfrak{e}_i, \quad \vec{\ell} = \sum_i \ell_i\, \mathfrak{e}_i. \tag{26}$$

Man darf aber *nicht* meinen, daß ein solcher Vektoroperator als Ganzes i. allg. eine Observable ist. Zum Beispiel zeigt die Nichtvertauschbarkeit der Drehimpulskomponenten, daß nicht alle Komponenten gleichzeitig scharf meßbar sind (Kap. 4.3), so daß es gar keinen Sinn hat, dem Vektoroperator $\vec{\ell}$ — als Repräsentanten für die Gesamtheit seiner Komponenten ℓ_i — eine Meßapparatur zuzuordnen. Für den Orts- bzw. Impulsoperator hingegen tritt wegen Gl. (8) bzw. (9) eine solche Schwierigkeit in (kartesischen) Komponenten nicht auf.

Das Transformationsverhalten der Komponenten eines Vektoroperators bei Drehungen im Ortsraum wird in 3.6 § 6 besprochen.

Aufg. 55: Man beweise

$$[\mathcal{L}, \mathcal{M}^n] = \sum_{\lambda=0}^{n-1} \mathcal{M}^\lambda [\mathcal{L}, \mathcal{M}]\, \mathcal{M}^{n-\lambda-1}, \ (n = \text{positiv ganz}).$$

Was folgt hieraus für $[p^r, x^s]$ (r, s = positiv ganz)?

Aufg. 56: Man berechne den Kommutator $[\mathscr{p}^{-1}, \mathscr{x}]$.

Aufg. 57: Man zeige, daß $\vec{\ell}$ mit $\vec{\mathscr{x}}^2$ und mit $\vec{\mathscr{p}}^2$ vertauscht.

§ 4. Analogien zum Poisson-Klammer-Formalismus der klassischen Physik

Vergleicht man die Rechenregeln der Poisson-Klammern [Gl. (1.2–59 bis 64)] mit jenen der Kommutatoren [Gl. (2.2–7)], so stellt man eine Analogie im algebraischen Sinn (also abgesehen von ihren verschiedenen Definitionen) fest. Im Gegensatz zu den klassischen Gleichungen ist in den Gl. (2.2–7_6) und (2.2–7_7) jedoch die Reihenfolge der Faktoren wesentlich.

Eine solche Analogie besteht aber nicht nur mathematisch. Auch die physikalischen Vertauschungsrelationen (8) bis (10) zwischen Ort- und Impulskomponenten stimmen mit den Poisson-Klammer-Relationen [Gl. (1.2–66)] formal überein. Man könnte daher meinen, daß man eine völlige Abbildung der klassischen Physik auf die Quantentheorie erhält, wenn man fordert, daß die Poisson-Klammer-Relationen zwischen den klassischen Größen in Kommutatorrelationen zwischen den entsprechenden Hermiteschen Operatoren übergehen,

$$\{L, M\} = N \rightarrow \frac{i}{\hbar}[\mathscr{L}, \mathscr{M}] = \mathscr{N}. \tag{27}$$

Diese „*Quantisierungsvorschrift*", die in der geschichtlichen Entwicklung der Quantentheorie eine gewisse Rolle gespielt hat, *stimmt für alle praktisch vorkommenden, einfachen Funktionen;* z. B. gehen die Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten direkt aus den Poisson-Klammer-Relationen (Aufg. 7) hervor. Dies ist die Ursache dafür, daß zwischen der klassischen Physik und der Quantenphysik formal eine weitgehende Analogie besteht (vgl. z. B. § 6). In voller Allgemeinheit aber führt die Vorschrift (27) auf *Widersprüche*, die auf der Nichtvertauschbarkeit der Operatoren beruhen.

Ein Beispiel möge dies erläutern. Wir setzen

$$L = p^3 x \rightarrow \mathscr{L} = \frac{1}{2}(\mathscr{p}^3 \mathscr{x} + \mathscr{x}\mathscr{p}^3).$$

$$M = x^2 \rightarrow \mathscr{M} = \mathscr{x}^2.$$

Dann ist die Poisson-Klammer $N = \{L, M\} = 6p^2x^2$. Um dieses Produkt entsprechend der Vorschrift (27) zu übersetzen, schreiben wir es einerseits als Poisson-Klammer

$$N = \frac{2}{3}\{p^3, x^3\} \rightarrow \mathscr{N} = \frac{2i}{3\hbar}[\mathscr{p}^3, \mathscr{x}^3] = 3(\mathscr{p}^2\mathscr{x}^2 + \mathscr{x}^2\mathscr{p}^2) + 2\hbar^2 \mathscr{1}$$

(zur Auswertung dieses Kommutators vgl. Aufg. 55). Berechnet man andererseits den Kommutator $\frac{i}{\hbar}[\mathscr{L}, \mathscr{M}]$, so findet man unter Berücksichtigung der Rechenregeln von Kommutatoren

$$\frac{i}{\hbar}[\mathscr{L}, \mathscr{M}] = 3(\mathscr{p}^2\mathscr{x}^2 + \mathscr{x}^2\mathscr{p}^2 + \hbar^2 \mathscr{1}),$$

also einen Ausdruck, der sich um $\hbar^2 \mathscr{1}$ von $\mathscr{N}$ unterscheidet.

§ 5. Die Rolle der Zeit in der Quantentheorie

Eine Meßapparatur kann eine bestimmte Observable eines physikalischen Systems zu verschiedenen Zeiten messen. Dabei ist die Zeit durch die Zeigerstellung einer makroskopischen Uhr gegeben. Diese Zeit ist also keine Observable des quantenmechanischen Systems selbst, sondern ein Parameter, der durch eine gewöhnliche, reelle Zahl t beschrieben wird.[1][2]

Die die Observablen des Systems beschreibenden HERMITEschen Operatoren $\mathscr{L}$ sind Funktionen dieses Parameters

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}(t). \tag{28}$$

Die Relationen zwischen den Observablen sind — sofern nichts anderes angegeben — zum gleichen Zeitpunkt gemeint.

Im Gegensatz zur klassischen Theorie ist es nicht einfach so, daß die Funktion (28) bereits die dynamische Entwicklung der quantentheoretischen Meßwerte und ihrer Wahrscheinlichkeiten angibt. Wie wir nämlich im nächsten Kapitel sehen werden, ist zu einer solchen Angabe noch eine weitere Größe — der Zustandsvektor oder der statistische Operator — notwendig, die den momentanen Zustand des physikalischen Systems beschreibt. Erst durch das *Zusammenwirken* von $\mathscr{L}$ und der den Zustand beschreibenden Größe gelangt man zu physikalischen Aussagen.

Die Zeitabhängigkeit (28) der Operatoren kommt auf zweierlei Weise zustande:

1. Durch ihre *explizite Zeitabhängigkeit:* In der HAMILTONschen Beschreibungsweise der klassischen Physik (1.2 § 4 und 1.7 § 9) ist eine Observable L gegeben als Funktion der kanonischen Variablen und möglicherweise einer expliziten Zeitabhängigkeit, die nichts mit der Zeitabhängigkeit vermöge der klassischen Bewegung zu tun hat, z. B. $L = L(x_1, \ldots, p_1, \ldots, t)$. Diese explizite Zeitabhängigkeit überträgt sich bei der Quantisierung auf die zugeordneten HERMITEschen Operatoren $\mathscr{L}$. *Sie ist eine wesentliche Eigenschaft der Observablen.*

2. Durch *zeitabhängige unitäre Transformation* der Operatoren (3.2 § 7): Durch eine willkürliche, unitäre Transformation *aller* Operatoren bleiben die Relationen zwischen den Operatoren erhalten. Je nachdem, welche Zeitabhän-

---

[1]) Diese Interpretation der Zeit t ist der Grund, warum die Energie-Zeit-Unschärferelation (3.5 § 4d) von anderer Natur ist als etwa jene zwischen Ort und Impuls (3.3 § 8). Die Frage, ob andererseits auch ein die Observable „Zeit des quantenmechanischen Systems" beschreibender Zeitoperator — kanonisch konjugiert zu $\mathscr{H}$ — existiert, führt auf mathematische Probleme, die hier nicht diskutiert werden sollen.

[2]) Völlig analoge Verhältnisse gelten bei der Feldquantisierung für die *Zeit- und Raumkoordinaten:* Die Feldoperatoren hängen von den c-Zahl-Parametern $\mathfrak{r}$ und t ab, die angeben, in welchem Raum-Zeit-Punkt die Feldgröße gemessen wird.

gigkeit man für diese unitäre Transformation zugrunde legt, resultieren für die Operatoren ganz verschiedene totale Zeitabhängigkeiten $\mathscr{L}(t)$ („*Bilder*"). Wir werden jedoch sehen (§ 7 und Kap. 3.5), daß alle physikalischen Aussagen der Quantentheorie bildunabhängig sind.

Schließlich sei noch auf eine dritte Art von zeitlicher Veränderung in der Quantentheorie hingewiesen: Unter dem Einfluß des *Meßprozesses* ergeben sich Veränderungen, die nicht durch den HAMILTON-Operator des mikroskopischen Objektes beschreibbar sind (Kap. 3.3).

§ 6. Der Zusammenhang zwischen den Operatoren $\mathring{\mathscr{L}}$ und $\mathscr{L}$

a) Die allgemeine Beziehung

Den Operator, der die Observable „Zeitliche Veränderung von L" beschreibt, haben wir mit $\mathring{\mathscr{L}}$ bezeichnet (§ 1). Wir verlangen nun, daß zwischen den Operatoren $\mathring{\mathscr{L}}$ und $\mathscr{L}$ der folgende, durch den HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ des Systems vermittelte Zusammenhang besteht

$$\boxed{\mathring{\mathscr{L}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{L}] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}}\,. \tag{29}$$

Diese Gleichung steht in enger Beziehung zu der Tatsache, daß der HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ mit einer infinitesimalen Zeittranslation verbunden ist [vgl. Fußnote [1]) S. 241]. Benützt man die Übersetzungsvorschrift (27), so entsteht sie einfach aus der Bewegungsgleichung einer klassischen Observablen L [Gl. (1.2–69) und (1.7–99)].

In der fundamentalen Relation (29) spiegeln sich sämtliche dynamische Gesetze der Quantentheorie wider. Wir wollen sie für alle physikalisch interessanten HERMITEschen Operatoren voraussetzen, also auch z. B. für den Fall, daß $\mathscr{L}$ ein Projektionsoperator ist.

Im Gegensatz zur klassischen Gleichung (1.2–69 und 1.7–99) handelt es sich aber bei Gl. (29) *nicht* um eine Differentialgleichung für die totale zeitliche Veränderung von $\mathscr{L}(t)$, weil ja $\mathring{\mathscr{L}}$ keine Differentiation nach dem Parameter t bedeutet.

Ist insbesondere

$$\mathring{\mathscr{L}} = \mathscr{O}\,, \tag{30}$$

so nennen wir wie in der klassischen Physik die Observable eine *Erhaltungsgröße*. Auf die physikalische Bedeutung dieser Aussage in der Quantentheorie kommen wir in 3.5 § 4 c zurück.

Identifiziert man $\mathscr{L}$ speziell mit den Operatoren x_i bzw. p_i, so erhält man die den HAMILTONschen Gleichungen entsprechenden Operatorbeziehungen

$$\boxed{\begin{aligned} \overset{\circ}{x}_i &= \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}, x_i] \\ \overset{\circ}{p}_i &= \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}, p_i] \\ \overset{\circ}{\mathscr{H}} &= \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\right)_{ex} \end{aligned}} \tag{31}$$

Wenngleich der Operator $\overset{\circ}{\mathscr{L}}$ nicht durch zeitliche Differentiation aus dem Operator $\mathscr{L}$ hervorgeht, lassen sich doch vermöge der rechten Seite von Gl. (29) Rechenregeln aufstellen, die den Differentiationsgesetzen entsprechen. Es gilt z. B.

$$\left.\begin{aligned} \overset{\circ}{\overbrace{c\,\mathscr{L}}} &= c\,\overset{\circ}{\mathscr{L}} + \dot{c}\,\mathscr{L}, \\ \overset{\circ}{\overbrace{\mathscr{L}_1 + \mathscr{L}_2}} &= \overset{\circ}{\mathscr{L}}_1 + \overset{\circ}{\mathscr{L}}_2, \\ \overset{\circ}{\overbrace{\mathscr{L}_1\,\mathscr{L}_2}} &= \overset{\circ}{\mathscr{L}}_1\,\mathscr{L}_2 + \mathscr{L}_1\,\overset{\circ}{\mathscr{L}}_2 \quad \text{(Reihenfolge!)}. \end{aligned}\right| \tag{32}$$

Beweis: Die Gleichungen folgen unmittelbar aus den Kommutatorregeln (2.2–7) und Gl. (2.2–11 a). Zum Beispiel verläuft der Nachweis der letzten Beziehung folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\overbrace{\mathscr{L}_1\,\mathscr{L}_2}} &= \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{L}_1\,\mathscr{L}_2] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}_1 \mathscr{L}_2}{\partial t}\right)_{ex} \\ &= \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{L}_1]\,\mathscr{L}_2 + \frac{i}{\hbar}\,\mathscr{L}_1[\mathscr{H}, \mathscr{L}_2] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}_1}{\partial t}\right)_{ex} \mathscr{L}_2 + \mathscr{L}_1 \left(\frac{\partial \mathscr{L}_2}{\partial t}\right)_{ex} \\ &= \overset{\circ}{\mathscr{L}}_1\,\mathscr{L}_2 + \mathscr{L}_1\,\overset{\circ}{\mathscr{L}}_2. \end{aligned}$$

b) Erstes Beispiel: Ein Teilchen in einem Potential

Wir betrachten ein Teilchen in einem Potential, so daß der HAMILTON-Operator lautet

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\,\vec{p}^{\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}). \tag{33}$$

Aus den Gl. (31) ergibt sich damit

$$\overset{\circ}{\vec{x}} = \frac{i}{2m\hbar}\left[\vec{p}^{\,2}, \vec{x}\right] = \frac{1}{m}\,\vec{p} = \vec{v} \quad \text{(Geschwindigkeit)}, \tag{34}$$

$$\overset{\circ}{\vec{p}} = \frac{i}{\hbar}\left[\mathscr{V}(\vec{x}), \vec{p}\right] = -\operatorname{grad}_x \mathscr{V} = \vec{\mathscr{K}} \quad \text{(Kraft)}, \tag{35}$$

$$\overset{\circ}{\mathscr{H}} = \mathscr{O} \quad (\mathscr{H} \text{ ist Erhaltungsgröße}). \tag{36}$$

Für den Operator der zeitlichen Änderung des Drehimpulses erhält man

$$\overset{\circ}{\vec{\ell}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{V}\left(\vec{x}\right), \vec{\ell}\right] = \vec{x} \times \vec{\mathscr{K}} = \vec{\mathscr{M}} \qquad \text{(Moment)}, \tag{37}$$

dabei ist berücksichtigt, daß $[\vec{p}^{\,2}, \vec{\ell}] = \mathscr{O}$ (Aufg. 57) und

$$[\mathscr{V}, \ell_1] = x_2[\mathscr{V}, p_3] - x_3[\mathscr{V}, p_2] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\vec{x} \times \operatorname{grad} \mathscr{V}\right)_1$$

ist.

Die Gleichungen zeigen, daß die Grundgesetze der klassischen Mechanik also quantentheoretisch durch die zugeordneten HERMITEschen Operatoren erfüllt werden. Die Kommutatorrelationen stimmen in diesem Fall völlig mit den POISSON-Klammer-Relationen überein.

c) Zweites Beispiel: Ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld

Die klassische Dynamik eines geladenen Teilchens in einem vorgegebenen elektromagnetischen Feld

$$\begin{aligned} \mathfrak{E}(\mathfrak{r}, t) &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathfrak{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} \varphi, \\ \mathfrak{B}(\mathfrak{r}, t) &= \operatorname{rot} \mathfrak{A} \end{aligned} \tag{38}$$

wird nach Gl. (1.2–84) durch die (explizit zeitabhängige) HAMILTON-Funktion

$$H(\mathfrak{r}, \mathfrak{p}, t) = \frac{1}{2m}\left(\mathfrak{p} - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}(\mathfrak{r}, t)\right)^2 + q\varphi(\mathfrak{r}, t) \tag{39}$$

beschrieben.

Beim Übergang zur *quantentheoretischen Beschreibung des Teilchens* werden die Teilchenvariablen

$$\mathfrak{r} \to \vec{x}, \quad \mathfrak{p} \to \vec{p}$$

zu kanonisch konjugierten HERMITEschen Operatoren, so daß die Feldgrößen

$$\mathfrak{E}\left(\vec{x}, t\right), \quad \mathfrak{B}\left(\vec{x}, t\right), \quad \mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right), \quad \varphi\left(\vec{x}, t\right) \tag{40}$$

Funktionen des Ortsoperators werden.[1] Der HAMILTON-Operator des Teilchens lautet dann

$$\boxed{\mathscr{H}\left(\vec{x}, \vec{p}, t\right) = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\,\mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right)\right)^2 + q\varphi\left(\vec{x}, t\right)}\,. \tag{41}$$

[1]) Dies bedeutet noch *keine* Quantisierung des elektromagnetischen Feldes (Lichtquanten)! Bei einer solchen werden vielmehr die elektromagnetischen Feldgrößen *selbst* zu Operatoren $\vec{\mathscr{E}}(\mathfrak{r}, t)$, $\vec{\mathscr{B}}(\mathfrak{r}, t), \ldots$, die von den Raum-Zeit-Koordinaten $\mathfrak{r}, t$ (c-Zahl-Parameter) abhängen (Kap. 4.6). Damit keine Verwechslungen zwischen diesen verschiedenen Problemen auftreten, haben wir in Gl. (40) für die Funktionen des Ortsoperators die klassischen Bezeichnungen beibehalten und die Operatoreigenschaften im Argument zum Ausdruck gebracht.

Multiplizieren wir unter Berücksichtigung der Reihenfolge aus, so erhalten wir

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \frac{q}{2mc}\left(\vec{p}\,\mathfrak{A} + \mathfrak{A}\,\vec{p}\right) + \frac{q^2}{2mc^2}\mathfrak{A}^2 + q\varphi. \tag{41a}$$

Dabei liegt bereits die symmetrische Schreibweise vor, wie sie durch Gl. (16) gefordert wird. Aus Gl. (18) folgt für den Kommutator zwischen $\mathfrak{A}$ und $\vec{p}$

$$\mathfrak{A}\,\vec{p} - \vec{p}\,\mathfrak{A} = -\frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right), \tag{42}$$

so daß man den Hamilton-Operator auch in der Form

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} - \frac{q}{mc}\mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right)\vec{p} - \frac{q\hbar}{2imc}\operatorname{div}\mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right) + \frac{q^2}{2mc^2}\mathfrak{A}^2\left(\vec{x}, t\right) + q\varphi\left(\vec{x}, t\right) \tag{41b}$$

schreiben kann. [1])

Für den Operator der *Geschwindigkeit* eines Teilchens im elektromagnetischen Feld erhalten wir nach Gl. (31) und (17)

$$v_i \equiv \overset{\circ}{x}_i = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_i} = \frac{1}{m}\left(p_i - \frac{q}{c}A_i\left(\vec{x}, t\right)\right).$$

Es besteht also zwischen dem mechanischen und dem kanonischen Impuls derselbe Zusammenhang wie in der klassischen Mechanik,

$$\boxed{m\vec{v} = \vec{p} - \frac{q}{c}\mathfrak{A}\left(\vec{x}, t\right)}\,. \tag{43}$$

Als Funktion der Operatoren $\vec{x}$ und $\vec{v}$ nimmt damit der Hamilton-Operator die einfache Gestalt

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2}\vec{v}^{\,2} + q\varphi\left(\vec{x}, t\right) \tag{44}$$

an.

Es ist zu beachten, daß die verschiedenen Komponenten der Geschwindigkeit — im Gegensatz zu denen des kanonischen Impulses — in einem magnetischen Feld nicht vertauschbar sind. Es gilt nämlich z. B.

$$\begin{aligned}[v_1, v_2] &= \frac{1}{m^2}\left[p_1 - \frac{q}{c}A_1,\ p_2 - \frac{q}{c}A_2\right]\\ &= \frac{q}{m^2c}\left(-[A_1, p_2] - [p_1, A_2]\right)\\ &= \frac{q\hbar}{m^2ci}\left(\frac{\partial A_1}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_1}\right),\end{aligned}$$

d. h.,

$$\frac{i}{\hbar}[v_1, v_2] = -\frac{q}{m^2c}B_3\left(\vec{x}, t\right) \tag{45}$$

und entsprechende Gleichungen bei zyklischer Vertauschung der Indizes. Analoge klassische Gleichungen gelten in Poisson-Klammern (vgl. Aufg. 10).

[1]) Wählt man für $\mathfrak{A}$ insbesondere die transversale Eichung [Gl. (1.2-77)], so ist $\operatorname{div}\mathfrak{A}(\vec{x},t) = 0$.

Für den Operator der *Beschleunigung* eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

$$\mathscr{b}_i \equiv \overset{\circ}{v}_i = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, v_i] + \left(\frac{\partial v_i}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}, {}^{1)}$$

erhält man, wenn man Gl. (44) einsetzt,

$$\mathscr{b}_i = \frac{m\,\mathrm{i}}{2\hbar}\left[\vec{v}^{\,2}, v_i\right] + \frac{q\,\mathrm{i}}{m\,\hbar}\,[\varphi, \not{p}_i] - \frac{q}{mc}\,\frac{\partial A_i}{\partial t}.$$

Wegen Gl. (45) gilt z. B.

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\vec{v}^{\,2}, v_1\right] &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_k \left([v_k, v_1]\,v_k + v_k[v_k, v_1]\right)\\ &= \frac{q}{m^2 c}\,(B_3 v_2 - B_2 v_3 + v_2 B_3 - v_3 B_2)\\ &= \frac{q}{m^2 c}\left((\vec{v}\times\mathfrak{B})_1 - (\mathfrak{B}\times\vec{v})_1\right),\end{aligned}$$

so daß man bei Berücksichtigung von Gl. (38) findet

$$\boxed{m\,\vec{\mathscr{b}} = \frac{q}{2c}\left(\vec{v}\times\mathfrak{B}(\vec{x}, t) - \mathfrak{B}(\vec{x}, t)\times\vec{v}\right) + q\,\mathfrak{E}(\vec{x}, t) = \vec{\mathscr{K}}_L(\vec{x}, \vec{v}, t)}, \qquad (46)$$

d. h. also gerade jenen Operator, der sich auch direkt durch Übersetzung der klassischen LORENTZ-Kraft ergibt. [2])

Aufg. 58: Man stelle den Operator der Beschleunigung $\overset{\circ\circ}{x}$ durch $\mathscr{H}$ und x dar.

Aufg. 59: a) Welcher Zusammenhang besteht in der Energiedarstellung zwischen den Matrixelementen von $\overset{\circ}{\mathscr{L}}$ und $\mathscr{L}$? b) Welche Beziehungen herrschen damit zwischen den Matrixelementen des Orts-, Impuls- und Kraftoperators eines Teilchens in einem Potential?

Aufg. 60: Man beweise für ein Teilchen in einem Potential, das bei Summation über alle Energieeigenvektoren $|u_a\rangle$ gilt

$$S_1 = \mathop{\not{\Sigma}}_a (E_a - E_n)\,|\langle u_a|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,u_n\rangle|^2\,\mathrm{d}a = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

und

$$S_2 = \mathop{\not{\Sigma}}_a (E_a - E_n)\,|\langle u_a|\,x\,u_n\rangle|^2\,\mathrm{d}a = \frac{\hbar^2}{2m},$$

falls E_n ein diskreter Energieeigenwert ist (*„Summenformeln"*).

Aufg. 61: Man beweise den quantentheoretischen Virialsatz (vgl. Aufg. 2).

---

[1]) Nach Gl. (43) kann $\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}, \vec{\not{p}}, t)$ explizit von t abhängen.

[2]) Wegen $(\vec{v}\times\mathfrak{B})^\dagger = -(\mathfrak{B}^\dagger\times\vec{v}^{\,\dagger}) = -(\mathfrak{B}\times\vec{v})$ ist der Operator $\frac{1}{2}(\vec{v}\times\mathfrak{B} - \mathfrak{B}\times\vec{v})$ HERMITEsch. Er entspricht nach Gl. (16) der klassischen Größe $\mathfrak{v}\times\mathfrak{B} = \frac{1}{2}(\mathfrak{v}\times\mathfrak{B} - \mathfrak{B}\times\mathfrak{v})$.

§ 7. Unitäre Transformationen

a) Unitär-Äquivalenz

Durch die Relationen zwischen den den Observablen zugeordneten HERMITEschen Operatoren werden diese nicht eindeutig definiert. Führt man nämlich an *allen* Operatoren $\mathscr{L}$ eine unitäre Transformation $\mathscr{A}$ ($\mathscr{A}^\dagger = \mathscr{A}^{-1}$) aus

$$\mathscr{L} \to \mathscr{L}' = \mathscr{A}\,\mathscr{L}\,\mathscr{A}^\dagger, \tag{47}$$

so erhält man einen neuen Satz von Operatoren $\mathscr{L}'$, die wieder HERMITEsch sind, dieselben Eigenwerte wie $\mathscr{L}$ besitzen (2.3 § 7) und zwischen denen dieselben Relationen bestehen wie zwischen den ursprünglichen Operatoren [Gl. (2.2–34)]. *Die Gesamtheit der die quantentheoretischen Observablen beschreibenden* HERMITE*schen Operatoren ist also nur bis auf Unitär-Äquivalenz festgelegt*, man kann statt der Operatoren $\mathscr{L}$ genausogut irgendwelche unitär transformierte Operatoren $\mathscr{L}'$ verwenden. Wir werden in der Tat sehen (Kap. 3.3), daß *sämtliche quantentheoretischen Aussagen über physikalische Ereignisse invariant sind gegenüber solchen unitären Transformationen a l l e r* HERMITE*scher Operatoren.*

b) Bilder

Man kann diese Freiheit in der Darstellung der Observablen noch dahingehend erweitern, daß man die unitären Transformationen von einem Parameter abhängen läßt. Als diesen Parameter wollen wir die Zeit t wählen. Man transformiert also *alle* HERMITEschen Operatoren mit einem *zeitabhängigen unitären Operator* $\mathscr{A}(t)$. Auf diese Weise wird eine Observable L zu jedem Zeitpunkt im allgemeinen durch einen anderen HERMITEschen Operator beschrieben. Diese Zeitabhängigkeit $\mathscr{L}(t)$ hängt von der willkürlich gewählten unitären Transformation $\mathscr{A}(t)$ ab und hat mit der quantentheoretischen Dynamik zunächst nichts zu tun. Sie ist auch nicht zu verwechseln mit der expliziten Zeitabhängigkeit der Operatoren. Die aus einer bestimmten zeitabhängigen unitären Transformation $\mathscr{A}(t)$ entstehenden Operatoren $\mathscr{L}(t)$ nennt man ein „*Bild*“[1]. Verschiedene Bilder unterscheiden sich also durch verschiedene unitäre Transformationen $\mathscr{A}(t)$. Dieselben Observablen werden in verschiedenen Bildern i. allg. durch verschiedene Zeitfunktionen $\mathscr{L}(t)$ erfaßt. Weil die Relationen zwischen den Operatoren bei einer unitären Transformation erhalten bleiben, gelten sie in *jedem* Bild, also z. B.

$$\mathring{\mathscr{L}}(t) = \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}(t), \mathscr{L}(t)] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}(t). \tag{48}$$

Welches Bild man für die Beschreibung zugrunde legt, ist physikalisch völlig irrelevant. Die Auswahl eines bestimmten Bildes ermöglicht jedoch manchmal leichter die mathematische Bewältigung dynamischer Probleme (Kap. 3.5).

---

[1]) Manchmal sagt man statt „Bild“ auch „Darstellung“. Da dieser Begriff jedoch bereits in einer anderen Bedeutung vorkommt, wollen wir lieber das Wort „Bild“ verwenden.

Wir wollen die Ausführung der unitären Transformation $\mathscr{A}(t)$ noch etwas genauer studieren. Zunächst betrachten wir z. B. die (explizit zeitunabhängigen!) Observablen Ort und Impuls und gehen etwa von einem Bild aus, in dem die Operatoren x und p keine Zeitfunktionen sind. Durch Anwendung einer bestimmten unitären Transformation $\mathscr{A}(t)$ ergeben sich dann für dieselben Observablen in dem neuen Bild die Zeitfunktionen

$$\begin{aligned} x(t) &= \mathscr{A}(t)\, x\, \mathscr{A}^\dagger(t), \\ p(t) &= \mathscr{A}(t)\, p\, \mathscr{A}^\dagger(t). \end{aligned} \tag{49}$$

Für einen Operator $\mathscr{L}$, der eine Funktion $\mathscr{L}(x, p)$ sei, erhält man damit nach Gl. (2.2-34)

$$\begin{aligned} \mathscr{L}(t) &= \mathscr{A}(t)\, \mathscr{L}(x, p)\, \mathscr{A}^\dagger(t) = \mathscr{L}(\mathscr{A}\, x\, \mathscr{A}^\dagger, \mathscr{A}\, p\, \mathscr{A}^\dagger) \\ &= \mathscr{L}\big(x(t), p(t)\big), \end{aligned} \tag{50}$$

d. h., *der unitär transformierte Operator* $\mathscr{L}(t)$ *ergibt sich, indem man in* $\mathscr{L}(x, p)$ *die Zeitfunktionen* (49) *einsetzt.*

Die Zeitabhängigkeit des Operators $\mathscr{L}(t)$ bedeutet, daß seine *Eigenvektoren* $|u_\Lambda\rangle$ ebenfalls Zeitfunktionen werden. Setzt man $\mathscr{L} = \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}$, so sieht man, daß sich diese — bis auf eine uninteressierende Phase — entsprechend

$$|u_\Lambda(t)\rangle = \mathscr{A}(t)\, |u_\Lambda\rangle \tag{51}$$

verändern. Die *Eigenwerte*

$$\Lambda = \langle u_\Lambda(t) \,|\, \mathscr{L}(t)\, u_\Lambda(t)\rangle = \langle u_\Lambda \,|\, \mathscr{L}\, u_\Lambda\rangle \tag{52}$$

bleiben natürlich bei einer unitären Transformation invariant, sie werden keine Zeitfunktion. Für die Gültigkeit der Gleichungen (50) bis (52) ist wesentlich. daß der Operator $\mathscr{L}$ nicht explizit zeitabhängig ist.

In dem allgemeinen Fall eines *explizit zeitabhängigen* Operators $\mathscr{L}(x, p, t)$ führt das Zusammenwirken der zeitabhängigen unitären Transformation $\mathscr{A}(t)$ und der expliziten Zeitabhängigkeit auf die *totale* Zeitabhängigkeit des Operators

$$\boxed{\mathscr{L}(t) = \mathscr{A}(t)\, \mathscr{L}(x, p, t)\, \mathscr{A}^\dagger(t) = \mathscr{L}\big(x(t), p(t), t\big)}\,. \tag{53}$$

Weil die willkürliche unitäre Transformation $\mathscr{A}(t)$ mit der expliziten Zeitabhängigkeit nichts zu tun hat, kann man die Gl. (53) noch etwas verallgemeinern: Man betrachtet den Operator $\mathscr{L}(x, p, \tau)$ zu einer Zeit τ und transformiert ihn mit $\mathscr{A}(t)$. Dabei erhält man

$$\mathscr{A}(t)\, \mathscr{L}(x, p, \tau)\, \mathscr{A}^\dagger(t) = \mathscr{L}\big(x(t), p(t), \tau\big). \tag{54}$$

In der geometrisch reellen Veranschaulichung der Operatoren $\mathscr{L}(t)$ durch Ellipsen bedeutet die zeitabhängige unitäre Transformation, daß sich diese im Laufe der Zeit *drehen*, wobei natürlich die Eigenvektoren diese Bewegung mitmachen. Eine Veränderung der Form der Ellipsen, d. h. eine zeitliche Abhängigkeit der Länge ihrer Hauptachsen (= reziproke Eigenwerte) kann sich jedoch nur bei Operatoren ergeben, die explizit zeitabhängig sind.

c) Zeitabhängigkeit der Hermiteschen Operatoren in einem Bild

Abschließend wollen wir noch nach der zeitlichen Veränderung eines Operators *in* einem festen Bild fragen, d. h. nach der Veränderung gegenüber einem beliebig herausgegriffenen Zeitpunkt t_0. Schreibt man die Gl. (50) für die Zeiten t_0 und t an

$$\mathcal{L}(t_0) = \mathcal{A}(t_0)\,\mathcal{L}(x,\ p)\,\mathcal{A}^\dagger(t_0),$$
$$\mathcal{L}(t) = \mathcal{A}(t)\,\mathcal{L}(x,\ p)\,\mathcal{A}^\dagger(t),$$

so erhält man durch Elimination von $\mathcal{L}(x,\ p)$

$$\mathcal{L}(t) = \mathcal{A}(t)\,\mathcal{A}^\dagger(t_0)\,\mathcal{L}(t_0)\,\mathcal{A}(t_0)\,\mathcal{A}^\dagger(t),$$

d. h., die Veränderung eines explizit zeitunabhängigen Operators,

$$\mathcal{L}(t) = \mathcal{A}(t,\ t_0)\,\mathcal{L}(t_0)\,\mathcal{A}^\dagger(t,\ t_0), \tag{55}$$

erfolgt innerhalb des betrachteten Bildes durch den unitären Operator

$$\mathcal{A}(t,\ t_0) = \mathcal{A}(t)\,\mathcal{A}^\dagger(t_0). \tag{56}$$

$\mathcal{A}(t,\ t_0)$ hat die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(t,\ t) &= 1, \\ \mathcal{A}(t,\ t_0) &= \mathcal{A}^\dagger(t_0,\ t), \\ \mathcal{A}(t,\ t_0) &= \mathcal{A}(t,\ t_1)\,\mathcal{A}(t_1,\ t_0), \end{aligned} \tag{57}$$

die unmittelbar aus Gl. (56) ersichtlich sind. Die letzte Gleichung besagt, daß man die Transformation schrittweise ausführen kann. *Die Operatoren* $\mathcal{A}(t,\ t_0)$ *sind das wesentliche eines Bildes.*

Im Fall einer *expliziten* Zeitabhängigkeit $\mathcal{L}(x,\ p,\ t)$ ist zu berücksichtigen, daß $\mathcal{A}(t)$ die explizite Zeitabhängigkeit nicht beeinflußt. Schreibt man die Gl. (54) einmal für $t \to t_0$, $\tau \to t$

$$\mathcal{A}(t_0)\,\mathcal{L}(x,\ p,\ t)\,\mathcal{A}^\dagger(t_0) = \mathcal{L}\big(x(t_0),\ p(t_0),\ t\big) \tag{58}$$

und dann für $\tau = t$ an

$$\mathcal{A}(t)\,\mathcal{L}(x,\ p,\ t)\,\mathcal{A}^\dagger(t) = \mathcal{L}\big(x(t),\ p(t),\ t\big), \tag{59}$$

so erhält man

$$\boxed{\mathcal{L}\big(x(t),\ p(t),\ t\big) = \mathcal{A}(t,\ t_0)\,\mathcal{L}\big(x(t_0),\ p(t_0),\ t\big)\,\mathcal{A}^\dagger(t,\ t_0)}\,. \tag{60}$$

Man beachte, daß auf der rechten Seite in dem mittleren Ausdruck die explizite Zeitabhängigkeit zur Zeit t und nicht zur Zeit t_0 zu nehmen ist! Die explizite Zeitabhängigkeit ist eben eine Eigenschaft der Observablen selbst, die nicht durch die willkürliche unitäre Transformation $\mathcal{A}(t,\ t_0)$ bestimmt wird.

Bevor wir auf die quantentheoretische *Dynamik* eines physikalischen Problems eingehen können, müssen wir zunächst verstehen, welche Beziehungen zwischen den Operatoren und den im Experiment sich zeigenden physikalischen Eigenschaften eines Systems bestehen.

Drittes Kapitel

Die statistischen Aussagen der Quantentheorie

Es ist Aufgabe dieses Kapitels, den Zusammenhang zwischen der mathematischen Beschreibung der Observablen durch Operatoren und den im Meßprozeß sich ergebenden Resultaten zu vermitteln. Da die mikroskopischen Objekte ein statistisches Verhalten bei der Messung einer Observablen zeigen (3.1 § 4), gilt es, die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie über den Ausgang einer solchen Messung zu formulieren.

§ 1. Definition von Wahrscheinlichkeit und Erwartungswert

Vorbereitend seien einige statistische Begriffe — unabhängig von der quantentheoretischen Fragestellung — angegeben.

Führt man dieselbe Messung einer Größe L, die diskrete Werte Λ annehmen kann, unter gleichen Anfangsbedingungen öfters (n-mal) aus, und erhält man dabei n_Λ-mal ($\sum_\Lambda n_\Lambda = n$) einen Meßwert Λ, so bezeichnet man den Quotienten n_Λ/n als *relative Häufigkeit*. In der Grenze sehr vieler Messungen[1]) nennt man

$$w_\Lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{n_\Lambda}{n} \tag{1}$$

die *Wahrscheinlichkeit* des Meßwertes Λ (Fig. 46). Es ist $0 \leqq w_\Lambda \leqq 1$ und $\sum_\Lambda w_\Lambda = 1$.

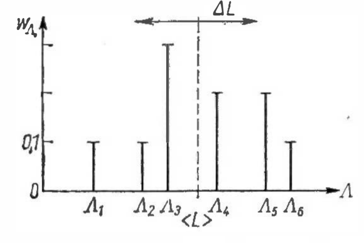


Fig. 46. Wahrscheinlichkeit w_Λ diskreter Meßwerte Λ. Erwartungswert $\langle L\rangle$ und Unschärfe ΔL

Ist für einen Meßwert Λ_s insbesondere $w_{\Lambda_s} = 1$ — und damit alle anderen $w_\Lambda = 0$ ($\Lambda \neq \Lambda_s$) —, so heißt dies, daß der Meßwert Λ_s mit *Sicherheit*[2]) eintritt und alle anderen Werte $\Lambda \neq \Lambda_s$ nicht eintreten.

---

[1]) Es handelt sich hier nicht um einen Grenzwert im mathematischen Sinn, sondern um das empirische Prinzip der Stabilität der relativen Häufigkeiten in langen Versuchsreihen (Gesetz der großen Zahlen).

[2]) „Fast-Sicherheit" im Sinne der Statistik.

Die Wahrscheinlichkeit, daß von einigen Meßwerten $\Lambda_1, \Lambda_2, \ldots, \Lambda_\varrho$ *entweder* Λ_1 *oder* Λ_2 *oder* $\Lambda_3 \ldots$ eintritt, ist die Summe ihrer Wahrscheinlichkeiten

$$w_{\Lambda_1 \cdots \Lambda_\varrho} = \sum_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_\varrho} w_\Lambda . \tag{2}$$

Als *Erwartungswert* oder *Mittelwert* einer Meßreihe versteht man

$$\langle L \rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_\Lambda n_\Lambda \Lambda = \sum_\Lambda w_\Lambda \Lambda , \tag{3}$$

wobei Λ über *alle* möglichen Meßwerte läuft. Der Erwartungswert muß mit keinem Meßwert übereinstimmen (Fig. 46).

Die *Streuung* ist definiert als die mittlere, quadratische Abweichung vom Erwartungswert

$$\text{Str}\, L = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_\Lambda n_\Lambda (\Lambda - \langle L \rangle)^2 = \sum_\Lambda w_\Lambda (\Lambda - \langle L \rangle)^2 \tag{4}$$

(Λ durchläuft alle möglichen Meßwerte). Die Streuung kann als Summe über lauter positive Größen nicht negativ werden. *Für das Verschwinden der Streuung ist notwendig und hinreichend, daß ein Meßwert Λ_s mit Sicherheit vorliegt:* $w_{\Lambda_s} = 1$, $w_\Lambda = 0$ $(\Lambda \neq \Lambda_s)$, $\langle L \rangle = \Lambda_s$.

Unter der *Unschärfe*, *Unbestimmtheit* oder *Unsicherheit* der Messung von L versteht man die Wurzel aus der Streuung

$$\Delta L = \sqrt{\text{Str}\, L} . \tag{5}$$

Schließlich sei noch ein Wort für den Fall gesagt, daß die möglichen Meßwerte Λ *kontinuierlich* sind. Erhält man bei einer Meßreihe zwischen Λ und $\Lambda + \mathrm{d}\Lambda$ $n(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda$ Meßwerte, so tritt an die Stelle von w_Λ die Größe

$$w(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda . \tag{6}$$

Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen Meßwert zwischen Λ und $\Lambda + \mathrm{d}\Lambda$ vorzufinden. Die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert irgendwo in einem vorgegebenen, endlichen Intervall $\Lambda_a \cdots \Lambda_b$ eintritt, ist dann — analog zu Gl. (2) — gegeben durch das Integral

$$w(\Lambda_a, \Lambda_b) = \int_{\Lambda_a}^{\Lambda_b} w(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda . \tag{7}$$

Umfaßt das Intervall *alle* möglichen Meßwerte, so ist das Integral 1 (Sicherheit)

$$1 = \int_\Lambda w(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda . \tag{8}$$

Der Erwartungswert $\langle L \rangle$ ist gegeben durch das Integral über alle Λ-Werte

$$\langle L \rangle = \int_\Lambda w(\Lambda)\,\Lambda\,\mathrm{d}\Lambda . \tag{9}$$

Für diskrete und/oder kontinuierliche Meßwerte Λ lautet — in der auf S. 117 erklärten zusammenfassenden Schreibweise — die Wahrscheinlichkeit in einem Intervall $\Lambda_a \cdots \Lambda_b$

$$w(\Lambda_a, \Lambda_b) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda_a}^{\Lambda_b} w(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda\,, \tag{10}$$

die Gesamtwahrscheinlichkeit

$$1 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} w(\Lambda)\,\mathrm{d}\Lambda \tag{11}$$

und der Erwartungswert

$$\langle L \rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} w(\Lambda)\,\Lambda\,\mathrm{d}\Lambda\,. \tag{12}$$

§ 2. Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ und Erwartungswert $\langle \mathscr{L} \rangle$

Um über den Ausgang der Messung einer quantenmechanischen Observablen zu einem bestimmten Zeitpunkt Aussagen machen zu können, ist es notwendig, den *Zustand*, in dem sich das physikalische System unmittelbar *vor* der Messung befindet, zu beschreiben. Durch eine mathematische Verknüpfung zwischen der den Zustand erfassenden Größe und dem Operator, der die zu messende Observable darstellt, muß es dann möglich sein, die gewünschten quantentheoretischen Aussagen über den Meßprozeß zu machen.

Da die Operatoren Vektorzuordnungen in einem unitären Vektorraum vermitteln, ist es naheliegend — und durch den Erfolg gerechtfertigt — *den Zustand des quantenmechanischen Systems durch einen Vektor* $|\Phi\rangle$, *den Zustandsvektor, in diesem unitären Raum zu beschreiben.* Eine der wesentlichsten Behauptungen der Quantentheorie ist, daß eine über die Beschreibung durch $|\Phi\rangle$ hinausgehende detailliertere Festlegung des physikalischen Zustands prinzipiell unmöglich ist.

Wird der unitäre Vektorraum durch irgendwelche Basisvektoren $|v_k\rangle$ aufgespannt, so können wir den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ nach ihnen zerlegen [Gl. (2.1–30)]

$$|\Phi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k} |v_k\rangle\,\Phi(k)\,\mathrm{d}k\,. \tag{13}$$

Die Komponenten $\Phi(k)$ sind gegeben durch die Skalarprodukte

$$\Phi(k) = \langle v_k \mid \Phi \rangle\,, \tag{14}$$

von denen wir noch sehen werden, daß sie die in 3.1 § 4 erwähnten *Wahrscheinlichkeitsamplituden* darstellen.

Die weiteren Überlegungen werden außerdem zeigen, daß es genügt, einen auf 1 *normierten* Zustandsvektor in Betracht zu ziehen,

$$\|\Phi\| = 1\,, \tag{15}$$

d. h. in Komponenten

$$\sum_k\!\!\!\!\!\!\int \Phi^*(k)\,\Phi(k)\,\mathrm{d}k = 1\,. \tag{16}$$

Ist insbesondere der unitäre Vektorraum unendlich-dimensional, so heißt dies, daß $|\Phi\rangle$ ein echter HILBERT-*Raum-Vektor* sein muß — also *kein* im Sinne der δ-Funktion normierter DIRACscher Vektor (2.1 § 3). Seine Komponenten $\Phi(k)$ sind also quadratintegrable Funktionen.

Es drängt sich sofort die Frage auf, in welcher Weise die „Richtung" des Zustandsvektors $|\Phi\rangle$ im unitären Raum festgelegt wird, wenn man durch Messung an dem mikroskopischen Objekt eine gewisse Kenntnis über seinen Zustand erhalten hat. Wir wollen dieses Problem aber zunächst zurückstellen und umgekehrt fragen, welche Aussagen man über den *Ausgang* der Messung einer Observablen, beschrieben durch einen HERMITEschen Operator $\mathscr{L}$, erhält, wenn der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ unmittelbar *vor* der Messung *bekannt* ist. Wie wir am Beispiel des Spaltversuches (3.1 § 4) gesehen haben, ergeben sich bei mehrmaliger Ausführung einer Messung derselben Observablen i. allg. ganz verschiedene Meßergebnisse, auch wenn das System vor der Messung immer im gleichen Zustand war. Wenn wir also wissen, daß sich das Meßobjekt in einem Zustand $|\Phi\rangle$ befindet, so können wir über den Ausgang der Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ *nur Vorhersagen über den Mittelwert oder Erwartungswert* $\langle\mathscr{L}\rangle$ der verschiedenen möglichen Meßwerte machen. Die fundamentale Behauptung der Quantentheorie (M. BORN) ist, daß *dieser Erwartungswert durch das Skalarprodukt der Vektoren* $|\Phi\rangle$ *und* $|\mathscr{L}\Phi\rangle$ *gegeben ist* (Fig. 47). Dieser Zusammenhang zwischen dem Meßprotokoll und den im mathematischen Kalkül der Quantentheorie vorkommenden Größen bestätigt sich in allen Experimenten.

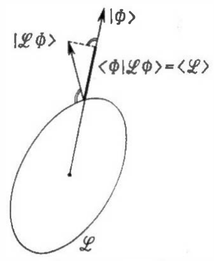


Fig. 47. Zur Veranschaulichung der Erwartungswertberechnung im Vektorraum

Wir fassen die statistische Aussage der Quantentheorie in dem Postulat zusammen:

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch einen Einheitsvektor $|\Phi\rangle$ *im unitären Raum völlig beschrieben. Führt man an dem System die Messung einer Observablen* $\mathscr{L}$ *sehr oft aus, und ist vor jeder Messung das System immer im gleichen Zustand* $|\Phi\rangle$, *so ist der Mittelwert* $\langle\mathscr{L}\rangle$ *der Meßergebnisse (Erwartungswert) gegeben durch*

$$\boxed{\langle\mathscr{L}\rangle = \langle\Phi\,|\,\mathscr{L}\,\Phi\rangle}\,. \tag{17}$$

Dieses Postulat zieht weitreichende Folgerungen nach sich, die im folgenden besprochen werden sollen.

Die HERMITEizität von $\mathscr{L}$ gewährleistet, daß der Erwartungswert eine reelle Zahl ist.

Ist der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ in einer Basis $|v_k\rangle$ durch seine Komponenten $\Phi(k) = \langle v_k \mid \Phi\rangle$ und der Operator $\mathscr{L}$ durch seine Matrixelemente $L(k, k') = \langle v_k \mid \mathscr{L}\, v_{k'}\rangle$ gegeben, so erhält man aus Gl. (17) durch zweimaliges Einschieben von $1 = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |v_k\rangle \langle v_k|\, \mathrm{d}k$ [Gl. (2.2–20)] für den Erwartungswert

$$\langle\mathscr{L}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'} \langle\Phi \mid v_k\rangle \langle v_k \mid \mathscr{L}\, v_{k'}\rangle \langle v_{k'} \mid \Phi\rangle\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'$$

oder

$$\boxed{\langle\mathscr{L}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k'} L(k, k')\, \Phi^*(k)\, \Phi(k')\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'}\,. \tag{18}$$

Im Basissystem der Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ von $\mathscr{L}$,

$$\mathscr{L}\, |u_\Lambda\rangle = \Lambda\, |u_\Lambda\rangle,$$

ist $L(\Lambda, \Lambda') = \Lambda\, \delta(\Lambda, \Lambda')$ diagonal, so daß die HERMITEsche Form (18) die Hauptachsengestalt

$$\langle\mathscr{L}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Lambda \Lambda\, |\Phi(\Lambda)|^2\, \mathrm{d}\Lambda \qquad (\Phi(\Lambda) = \langle u_\Lambda \mid \Phi\rangle) \tag{19}$$

annimmt ($\mathscr{L}$-Darstellung). Sind die Eigenwerte Λ *entartet* (2.3 § 5), so lautet die Entwicklung des Zustandsvektors $|\Phi\rangle$ nach den orthonormierten Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$, die die Eigenräume $\mathfrak{u}_\Lambda$ aufspannen,

$$|\Phi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\Lambda,\mu} |u_\Lambda^\mu\rangle\, \Phi(\Lambda, \mu)\, \mathrm{d}\mu\, \mathrm{d}\Lambda \qquad (\Phi(\Lambda, \mu) = \langle u_\Lambda^\mu \mid \Phi\rangle), \tag{20}$$

so daß sich in der Basis $|u_\Lambda^\mu\rangle$ für den Erwartungswert $\langle\mathscr{L}\rangle$ ergibt

$$\langle\mathscr{L}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Lambda \Lambda \sum\!\!\!\!\!\!\int_\mu |\Phi(\Lambda, \mu)|^2\, \mathrm{d}\mu\, \mathrm{d}\Lambda\,. \tag{21}$$

Es ist zweckmäßig, auch für die Beschreibung des Zustands einen HERMITEschen Operator zu verwenden. Als solcher bietet sich der Projektionsoperator auf den Zustandsvektor

$$\boxed{\mathscr{P}_{|\Phi\rangle} \equiv |\Phi\rangle \langle\Phi|}\,, \tag{22}$$

auch *statistischer Operator* (des „reinen" Zustands [vgl. Kap. 3.7]) genannt, an. Die Matrixelemente von $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ bezüglich einer Basis $|v_k\rangle$ sind das Produkt

$$\langle v_k \mid \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}\, v_{k'}\rangle = \langle v_k \mid \Phi\rangle \langle \Phi \mid v_{k'}\rangle = \Phi(k)\, \Phi^*(k'), \tag{23}$$

so daß Gl. (18) als Spur [Gl. (2.2–29)] von $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}\mathscr{L}$ gelesen werden kann. Man schreibt daher statt Gl. (17) auch häufig

$$\boxed{\langle\mathscr{L}\rangle = \mathrm{Sp}(\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}\mathscr{L})}\,. \tag{24}$$

Die Reihenfolge der Faktoren $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ und $\mathscr{L}$ ist unter der Spur gleichgültig (Aufg. 37). Die Berechnung der Spur kann in irgendeinem vollständigen Basissystem $|v_k\rangle$ erfolgen,

$$\langle\mathscr{L}\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k \langle v_k \,|\, \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}\mathscr{L}\, v_k\rangle\, \mathrm{d}k. \tag{24a}$$

Die Erwartungswerte kommen also durch das Zusammenwirken zweier HERMITE*scher Operatoren zustande, des statistischen Operators $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ des Zustands des Systems und des Operators $\mathscr{L}$ der zu messenden Observablen.*[1])

Aufg. 62: Man zeige, daß der Erwartungswert invariant ist gegen eine unitäre Transformation $|\Phi'\rangle = \mathscr{A}\,|\Phi\rangle$, $\mathscr{L}' = \mathscr{A}\,\mathscr{L}\,\mathscr{A}^\dagger$.

§ 3. Die Streuung einer Observablen

Führt man die Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ mehrmals aus (wobei das System vor der Messung immer im gleichen Zustand sei), so streuen i. allg. die Meßwerte um den Mittelwert $\langle\mathscr{L}\rangle$. Da die „Streuung" einer Observablen $\mathscr{L}$ als Erwartungswert der quadratischen Abweichung von $\langle\mathscr{L}\rangle$ definiert ist, erhält man $\mathrm{Str}\,\mathscr{L}$ als Erwartungswert des Operators $(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})^2$ im Zustand $|\Phi\rangle$,

$$\mathrm{Str}\,\mathscr{L} = \langle(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})^2\rangle = \langle\Phi\,|\,(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})^2\,\Phi\rangle. \tag{25}$$

Wegen

$$\langle(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})^2\rangle = \langle\mathscr{L}^2\rangle - 2\,\langle\,\mathscr{L}\langle\mathscr{L}\rangle\rangle + \langle\langle\mathscr{L}\rangle^2\rangle = \langle\mathscr{L}^2\rangle - \langle\mathscr{L}\rangle^2$$

gilt auch

$$\boxed{\mathrm{Str}\,\mathscr{L} = \langle\mathscr{L}^2\rangle - \langle\mathscr{L}\rangle^2 = \langle\Phi\,|\,\mathscr{L}^2\,\Phi\rangle - \langle\Phi\,|\,\mathscr{L}\,\Phi\rangle^2}\,. \tag{26}$$

Mit $\mathscr{L}$ ist auch $\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1}$ HERMITEsch, so daß man statt (25) auch $\langle(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})\,\Phi\,|\,(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})\,\Phi\rangle$ schreiben kann

$$\mathrm{Str}\,\mathscr{L} = \|(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle\,\mathbf{1})\,\Phi\|^2 \geqq 0. \tag{27}$$

---

[1]) Zwei Zustandsvektoren $|\Phi\rangle$ und $|\Phi'\rangle$, die sich nur um einen Phasenfaktor unterscheiden, $|\Phi'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\,|\Phi\rangle$, sind physikalisch gleichwertig: In den statistischen Operator $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle} = |\Phi\rangle\langle\Phi|$ geht die Phase überhaupt nicht ein, $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle} = \mathscr{P}_{|\Phi'\rangle}$. Die Erwartungswerte (24) sind unabhängig von der Phase des Zustandsvektors. Dasselbe gilt auch bezüglich einer Änderung der Phase der Basisvektoren: Die Spur (24a) ist invariant gegenüber der Transformation $|v_k\rangle \to |v_k'\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_k}\,|v_k\rangle$ (vgl. auch die Bemerkung am Ende von 2.1 § 4).

Die *Unschärfe* $\Delta L = \sqrt{\text{Str}\,\mathscr{L}}$ ist also nichts anderes als die Länge des Vektors $|(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle \mathbf{1})\,\Phi\rangle$,

$$\boxed{\Delta L = \|(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle \mathbf{1})\,\Phi\| \geqq 0}\,. \tag{28}$$

§ 4. Der Einfluß des Meßprozesses auf den Zustandsvektor

Wir wollen jene speziellen Richtungen $|\Phi_{\mathscr{L}}\rangle$ des Zustandsvektors betrachten, für die die Messung von $\mathscr{L}$ *streuungsfrei* wird. Dazu ist notwendig und hinreichend, daß $|(\mathscr{L} - \langle\mathscr{L}\rangle \mathbf{1})\,\Phi_{\mathscr{L}}\rangle = 0$ oder

$$\mathscr{L}\,|\Phi_{\mathscr{L}}\rangle = \langle\mathscr{L}\rangle\,|\Phi_{\mathscr{L}}\rangle \tag{29}$$

gilt, d. h., $|\Phi_{\mathscr{L}}\rangle$ muß Eigenvektor von $\mathscr{L}$ und $\langle\mathscr{L}\rangle$ der zugehörige Eigenwert sein. Da wir andererseits wissen (§ 1), daß bei Streuungsfreiheit der Erwartungswert zu einem mit Sicherheit vorliegenden Meßwert wird, können wir schließen: Ergibt sich bei einer Messung von $\mathscr{L}$ ein Meßwert mit Sicherheit, so ist der Meßwert ein Eigenwert Λ von $\mathscr{L}$, und der Zustandsvektor muß (*vor* der Messung!) die Richtung des dazugehörigen Eigenvektors $|u_\Lambda\rangle$ gehabt haben. Natürlich gilt auch die Umkehrung dieses Satzes: Ist vor der Messung $|\Phi\rangle = |u_\Lambda\rangle$, so ergibt sich bei der Messung von $\mathscr{L}$ mit Sicherheit der Eigenwert Λ als Meßwert. Ist der Eigenwert Λ entartet, so gilt Entsprechendes, wenn der Zustandsvektor im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ liegt.

Wir wollen jetzt nach der Richtung des Zustandsvektors unmittelbar *nach* Ausführung einer Messung fragen. Dazu betrachten wir ein quantenmechanisches System, das *vor* der Messung der Observablen $\mathscr{L}$ in einem *beliebigen* Zustand $|\Phi\rangle$ war. *Nach* Ausführung der Messung, die einen bestimmten Meßwert L' ergeben habe, laute der Zustandsvektor $|\Phi'\rangle$. Unmittelbar nach dieser Messung denken wir uns die Messung von $\mathscr{L}$ wiederholt — also jetzt mit dem Ausgangszustand $|\Phi'\rangle$:

$$\begin{array}{llll} \text{Zustand:} & |\Phi\rangle \xrightarrow{\text{1. Messung von } \mathscr{L}} & |\Phi'\rangle \xrightarrow{\text{2. Messung von } \mathscr{L}} & |\Phi''\rangle, \\ \text{Meßwert:} & \quad L' & \quad L'' & \end{array} \tag{30}$$

Wenn die Messungen überhaupt einen physikalischen Sinn haben sollen, so ist zu fordern, daß bei einer solchen unmittelbaren Wiederholung derselben Messung sich das Ergebnis der vorangehenden Messung nicht verändert (*Meßaxiom* einer „Idealmessung"); d. h., bei der zweiten Messung ist das Meßergebnis L'' mit Sicherheit gleich L'. Nach dem oben Gesagten muß daher $L' = L''$ ein Eigenwert Λ' von $\mathscr{L}$ sein und $|\Phi'\rangle$ die Richtung des Eigenvektors $|u_{\Lambda'}\rangle$ haben — oder im Fall der Entartung von Λ' im Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$ liegen.[1]) Damit haben wir — bezüglich der ersten Messung, die uns ja eigentlich interessiert —

[1]) Zunächst beschränken wir uns auf diskrete Eigenwerte.

das wichtige Ergebnis gewonnen: *Auch bei einem beliebigen Anfangszustand* $|\Phi\rangle$ *vor der Messung sind die überhaupt möglichen Meßwerte einer Observablen die (reellen) Eigenwerte* Λ *des (*HERMITE*schen) Operators* $\mathscr{L}$. *Der Zustandsvektor geht vermöge der Einwirkung der Meßapparatur in die Richtung des Eigenvektors* $|u_{\Lambda'}\rangle$ *von* $\mathscr{L}$ *über, der zu dem gemessenen (diskreten, nichtentarteten) Eigenwert* Λ' *gehört* (Fig. 48)

Messung eines diskreten, nichtentarteten Eigenwerts Λ':

$$|\Phi\rangle \rightarrow |\Phi'\rangle = |u_{\Lambda'}\rangle \tag{31}$$

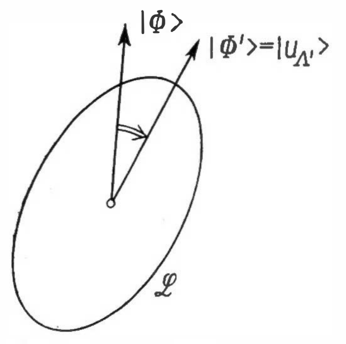


Fig. 48. Reduktion des Zustandsvektors $|\Phi\rangle \rightarrow |\Phi'\rangle$ durch eine $\mathscr{L}$-Messung

(*„Reduktion des Zustandsvektors" durch Messung).* Im Basissystem $|u_\Lambda\rangle$ ($\mathscr{L}$-Darstellung) heißt dies, daß der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$, der vor der Messung Komponenten $\Phi(\Lambda) = \langle u_\Lambda | \Phi\rangle$ hatte, unter dem Einfluß der Messung von Λ' zu einem Vektor wird, dessen Komponenten $\Phi'(\Lambda) = \langle u_\Lambda | \Phi'\rangle$ für $\Lambda \neq \Lambda'$ alle verschwinden, während für $\Lambda = \Lambda'$ $\Phi'(\Lambda) = \langle u_\Lambda | u_\Lambda\rangle = 1$ wird.

Eine Messung ist ausgeführt, wenn das Meßergebnis an der Meßapparatur makroskopisch fixiert ist. Es liegt z. B. eine Ortsmessung vor, wenn ein Teilchen im übersättigten Wasserdampf einer WILSON-Kammer die Kondensation eines (makroskopischen!) Wassertröpfchens ausgelöst und damit eine feststehende, makroskopische Veränderung hervorgerufen hat.

Wird durch die Messung ein bestimmter Meßwert an der makroskopischen Meßapparatur fixiert, so ist der Zustandsvektor des mikroskopischen Objekts für den Zeitpunkt unmittelbar nach der Messung bekannt. *Durch den Ausgang der Messung wird die Richtung des Zustandsvektors im unitären Vektorraum nach Gl. (31) festgelegt.*

Die Frage, auf welchem „Weg" sich der Zustandsvektor von $|\Phi\rangle$ nach $|\Phi'\rangle$ „bewegt" hat, läßt sich wegen des wesentlichen Einflusses der Meßapparatur überhaupt nicht im unitären Raum des Meßobjekts beschreiben. Für eine Behandlung des Meßprozesses ist vielmehr der direkte Produktraum von Meßobjekt und Meßapparatur $\mathfrak{U}_{\text{Obj}} \times \mathfrak{U}_{\text{App}}$ notwendig. Wir wollen jedoch hierauf nicht näher eingehen.

Ist das Eigenwertspektrum der zu messenden Observablen $\mathscr{L}$ *kontinuierlich,* und wurde durch die Apparatur ein Meßwert im infinitesimalen Intervall $\Lambda' \cdots \Lambda' + \Delta\Lambda'$ gefunden, so lautet der Zustandsvektor $|\Phi'\rangle$ nach der Messung

[vgl. 2.1 § 3 und Gl. (2.3–6)]

$$|\Phi\rangle \to |\Phi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta\Lambda'}} \int_{\Lambda'}^{\Lambda'+\Delta\Lambda'} |u_\Lambda^D\rangle \, d\Lambda \quad \text{für } \Delta\Lambda' \to 0 . \tag{32}$$

Wegen

$$\langle\Phi' \mid \Phi'\rangle = \frac{1}{\Delta\Lambda'} \iint_{\Lambda'}^{\Lambda'+\Delta\Lambda'} \langle u_\Lambda^D \mid u_{\bar\Lambda}^D\rangle \, d\bar\Lambda \, d\Lambda = \frac{1}{\Delta\Lambda'} \int_{\Lambda'}^{\Lambda'+\Delta\Lambda'} d\Lambda = 1$$

ist $|\Phi'\rangle$ ein Einheitsvektor.

Weiß man hingegen vom Meßwert nur, daß er irgendwo in einem *endlichen* Intervall $\delta\Lambda$ liegt, das die Ungenauigkeit der realen Meßapparatur beschreibt, so ist der Zustand des Systems nach der Messung *nicht* durch einen Zustands*vektor* zu beschreiben, sondern durch den *statistischen Operator eines Gemisches* (3.7 § 3).

Wenn der bei der Messung einer Observablen $\mathcal{L}$ eingetretene Eigenwert Λ' (jetzt wieder diskret angenommen) *entartet* (2.3 § 5) ist, so wissen wir bereits, daß $|\Phi'\rangle$ nach der Messung im Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$ liegt. Wird dieser von irgendwelchen (orthonormierten) Eigenvektoren $|u_{\Lambda'}^\mu\rangle$ $(\mu = 1, \ldots, t_{\Lambda'})$ aufgespannt, so gilt also

$$|\Phi'\rangle = \sum_{\mu=1}^{t_{\Lambda'}} |u_{\Lambda'}^\mu\rangle \, c_{\Lambda'}^\mu .$$

Wir werden in § 6 — unter Heranziehung einer plausiblen Voraussetzung — zeigen, daß die Koeffizienten $c_{\Lambda'}^\mu$ *nicht willkürlich*, sondern proportional zu $\langle u_{\Lambda'}^\mu | \Phi\rangle$ sind

$$|\Phi'\rangle = c \sum_\mu |u_{\Lambda'}^\mu\rangle \langle u_{\Lambda'}^\mu \mid \Phi\rangle, \tag{33}$$

d. h., *der Vektor* $|\Phi'\rangle$ *entsteht aus* $|\Phi\rangle$ *durch Projektion auf den Eigenraum* $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$ (Fig. 49). Bestimmt man den Betrag der Konstanten c aus der Normierungsbedingung $\langle\Phi' \mid \Phi'\rangle = 1$, so ergibt sich

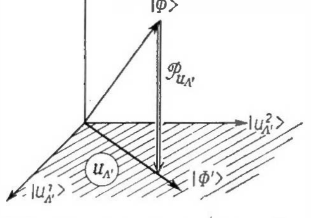


Fig. 49. Projektion des Zustandsvektors auf den Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$ bei Messung von Λ'

$$|\Phi\rangle \xrightarrow{\Lambda'} |\Phi'\rangle = \frac{\sum_\mu |u_{\Lambda'}^\mu\rangle\langle u_{\Lambda'}^\mu | \Phi\rangle}{\sqrt{\sum_\mu |\langle u_{\Lambda'}^\mu | \Phi\rangle|^2}} = \frac{|\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}} \Phi\rangle}{\|\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}} \Phi\|} . \tag{34}$$

Die Meßapparatur *filtert* also gerade jene Komponenten von $|\Phi\rangle$ heraus, die auf dem Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$ senkrecht stehen.

Die *Präparation* des Systems *durch eine Messung* möge an Hand eines einfachen Beispiels erläutert werden. Bringt man ein Teilchen mit einem magneti-

schen Moment $\vec{m}$ in ein Magnetfeld $\mathfrak{B}$, so lautet sein HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = - \vec{m}\, \mathfrak{B}\,.$$

Er ist proportional zur Komponente von $\vec{m}$ in $\mathfrak{B}$-Richtung. Das magnetische Moment ist nach Gl. (1.2–88) mit einem Drehimpuls verknüpft. Wie wir noch sehen werden (Kap. 4.3), kann eine Komponente des Drehimpulses — hier die Komponente in $\mathfrak{B}$-Richtung — als Folge der Vertauschungsrelationen nur einige diskrete Werte annehmen. Dasselbe gilt damit auch für die Komponente von $\vec{m}$ in $\mathfrak{B}$-Richtung. Diese diskreten Einstellmöglichkeiten machen sich experimentell bemerkbar, wenn man ein Teilchen mit einem magnetischen Moment durch ein *in*homogenes Feld laufen läßt, weil dann auf das Teilchen eine Kraft wirkt, die eine dem magnetischen Moment proportionale Ablenkung der Teilchenbahn hervorruft (STERN-GERLACH-Effekt). In Fig. 50 ist die Wirkung einer solchen Anordnung schematisch angegeben (durch geeignete Wahl der Inhomogenitäten werde dafür gesorgt, daß die Bahnen am Ende wieder parallel verlaufen). Wir betrachten nun den speziellen Fall, daß der Drehimpuls ℓ_z gerade drei Eigenwerte mit den Eigenvektoren $|u_+\rangle$, $|u_0\rangle$, $|u_-\rangle$ besitzt (dreidimensionaler unitärer Raum). Diese Möglichkeiten sind in Fig. 50 durch die drei gestrichelten Linien gekennzeichnet. Sorgt man nun etwa durch einen Absorber A dafür, daß ein Teilchen, wenn es auf der Bahn (0) oder (—) ankommt, absorbiert wird, so ist man sicher, daß sich ein durchgehendes Teilchen im Zustand

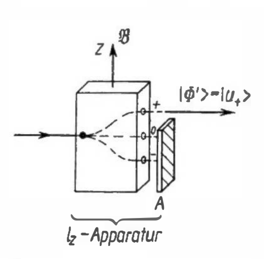


Fig. 50. Erzeugung des Zustands $|\Phi'\rangle = |u_+\rangle$ durch eine STERN-GERLACH-Apparatur

$$|\Phi'\rangle = |u_+\rangle$$

befindet, weil das System insgesamt nur drei Zustände aufweisen soll.[1]) Erst durch den Absorber A wird der Meßprozeß abgeschlossen: Vorher hat es keinen Sinn, von der „wirklichen Bahn" des Elektrons zu sprechen. Die drei Bahnen sind nur Möglichkeiten, d. h. ein Ausdruck für die möglichen Meßwerte von ℓ_z. Sie sind daher in der Fig. 50 gestrichelt gezeichnet.

Aufg. 63: Wie lautet der Einfluß des Meßprozesses auf den statistischen Operator $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$?

§ 5. Die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Meßwertes

Vor Ausführung der Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ läßt sich nicht mit Sicherheit sagen, welcher Meßwert sich aus der Vielfalt der Eigenwerte Λ ergibt — abgesehen von dem Fall, daß vor der Messung der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ die Richtung eines Eigenvektors $|u_\Lambda\rangle$ von $\mathscr{L}$ hat [Gl. (29)]. Es sind vielmehr bei

---

[1]) Wir behandeln nur die Drehimpulszustände. Von einer quantentheoretischen Beschreibung der Bahnbewegung sehen wir der Einfachheit halber ab. [In dieser wäre zu berücksichtigen, daß $-\vec{m}\,\mathfrak{B}(\vec{x})$ auch vom Ortsoperator $\vec{x}$ des Teilchens abhängt.]

beliebigem Zustand $|\Phi\rangle$ nur *Wahrscheinlichkeitsvorhersagen* möglich. Durch Vergleich der Definition des Erwartungswertes [Gl. (12)]

$$\langle \mathscr{L} \rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} w_\Lambda \, \Lambda \, \mathrm{d}\Lambda$$

mit der quantentheoretischen Gleichung (19)

$$\langle \mathscr{L} \rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} |\Phi(\Lambda)|^2 \, \Lambda \, \mathrm{d}\Lambda$$

finden wir, daß die *Wahrscheinlichkeit* — bzw. *im Kontinuum die Wahrscheinlichkeitsdichte* — w_Λ *für das Eintreten eines* (nichtentarteten) *Eigenwertes* Λ *gegeben ist durch das Absolutquadrat der Projektion des Zustandsvektors* $|\Phi\rangle$ *(vor der Messung!) auf den Eigenvektor* $|u_\Lambda\rangle$,

$$\boxed{w_\Lambda = |\Phi(\Lambda)|^2 = |\langle u_\Lambda | \Phi \rangle|^2} \,. \tag{35}$$

Man nennt daher die Komponenten $\Phi(\Lambda) = \langle u_\Lambda | \Phi \rangle$ des Zustandsvektors $|\Phi\rangle$ *Wahrscheinlichkeitsamplituden* für den Meßwert Λ (Fig. 51).

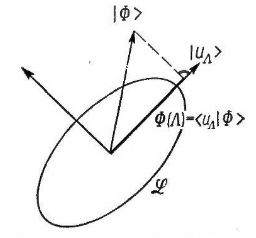


Fig. 51. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\Lambda)$ als Skalarprodukt $\langle u_\Lambda | \Phi \rangle$

Wenn $|\Phi\rangle$ genau in Richtung eines Eigenvektors $|u_\Lambda\rangle$ liegt, ist das Skalarprodukt 1, und die Wahrscheinlichkeit wird für den Meßwert Λ zur Sicherheit. Ist andererseits $|\Phi\rangle$ senkrecht auf einem Eigenvektor $|u_\Lambda\rangle$, so verschwindet $\langle u_\Lambda | \Phi \rangle$, und der Eigenwert Λ trifft mit Sicherheit nicht ein.

Die Wahrscheinlichkeit (35) hat die Gestalt $\langle \Phi | u_\Lambda \rangle \langle u_\Lambda | \Phi \rangle$ und kann daher als *Erwartungswert des Projektionsoperators* $\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} = |u_\Lambda\rangle \langle u_\Lambda|$ aufgefaßt werden,

$$\boxed{w_\Lambda = \langle \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} \rangle = \langle \Phi | \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} \Phi \rangle} \,.\text{[1] [2]} \tag{36}$$

Wie bereits in 3.2 § 1 dargelegt wurde, entspricht dem Projektionsoperator $\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}$ die Observable „*Ist das System im Zustand* $|u_\Lambda\rangle$*?*". Da die Eigenwerte von Projektionsoperatoren nur 1 oder 0 sind (2.3 § 6), bedeuten diese Meßwerte, daß das Experiment entscheidet, ob diese Frage mit Ja oder Nein zu beantworten ist. Vor der Messung kann man aber i. allg. nicht mit Sicherheit vorhersagen, welche Antwort durch die Messung gegeben wird. Man kann vielmehr nur den Erwartungswert $\langle \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} \rangle = \langle \Phi | \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} \Phi \rangle$ angeben, der sich einstellt, wenn man — immer wieder vom gleichen Zustand $|\Phi\rangle$ ausgehend — die Frage häufig durch

---

[1]) Weil $\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} = |u_\Lambda\rangle \langle u_\Lambda|$ gegenüber einer Phasentransformation $|u_\Lambda\rangle \to |u'_\Lambda\rangle = e^{i\alpha_\Lambda} |u_\Lambda\rangle$ invariant ist, geht in die Wahrscheinlichkeit w_Λ die Phase nicht ein (vgl. auch die Bemerkung am Ende von 2.1 § 4).

[2]) Im Fall eines kontinuierlichen Λ-Spektrums projiziert man auf DIRAC-Eigenvektoren $|u_\Lambda^D\rangle$. w_Λ ist dann die Wahrscheinlichkeits*dichte* für den Meßwert Λ, d.h., $w_\Lambda \, \mathrm{d}\Lambda$ ist die Wahrscheinlichkeit, das System im Intervall $\Lambda \cdots \Lambda + \mathrm{d}\Lambda$ anzutreffen.

das Experiment beantworten läßt. Der Erwartungswert von $\mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}$ ist aber als Mittelwert über viele Entscheidungen „Ist das System in $|u_\Lambda\rangle$?" gedanklich gleich der Wahrscheinlichkeit w_Λ für das Eintreffen von Λ. Die Gleichung (36) ist also auch unmittelbar einsichtig.

Ist ein Intervall $\Lambda_a \cdots \Lambda_b$ vorgegeben, in dem mehrere diskrete Eigenwerte oder/und ein Kontinuum liegen, so ist nach Gl. (10) die Wahrscheinlichkeit dafür, daß irgendeiner von diesen als Meßwert eintritt, gegeben durch die Summe der einzelnen Wahrscheinlichkeiten, bzw. durch das Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte [1])

$$w(\Lambda_a, \Lambda_b) = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{\Lambda_a}^{\Lambda_b} |\Phi(\Lambda)|^2 \, \mathrm{d}\Lambda \tag{37}$$

(Entweder-Oder-Wahrscheinlichkeit unabhängiger Ereignisse). Summiert bzw. integriert man über *alle* Λ, so bedeutet

$$1 = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{\Lambda} |\Phi(\Lambda)|^2 \, \mathrm{d}\Lambda, \tag{38}$$

daß sich irgendein Wert aus dem gesamten Λ-Spektrum mit Sicherheit einstellt. Da diese Bedingung durch die Normierung der Wahrscheinlichkeiten (§ 1) gefordert wird, mußten wir in Gl. (15) die Normierung des Zustandsvektors auf die Länge eins fordern.

Die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung einen *entarteten* Eigenwert Λ anzutreffen, ist nach Gl. (21)

$$\boxed{w_\Lambda = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{\mu} |\Phi(\Lambda, \mu)|^2 \, \mathrm{d}\mu = \langle \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda} \rangle = \mathrm{Sp}\, \mathscr{P}_{|\Phi\rangle} \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda}}, \tag{39}$$

was also wieder als Erwartungswert des Projektionsoperators $\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda} = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{\mu} |u_\Lambda^\mu\rangle \langle u_\Lambda^\mu| \mathrm{d}\mu$ auf den Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ gelesen werden kann.

Die Wahrscheinlichkeitsaussagen mögen wieder an Hand eines konkreten physikalischen Beispiels besprochen werden. Wir betrachten zwei STERN-GERLACH-Apparaturen hintereinander (Fig. 52). Die erste bewirkt die im § 4 erläuterte Präparation: Durch den Absorber A ist man gewiß, daß ein herauskommendes Teilchen im Eigenzustand $|u_{+z}\rangle$ von ℓ_z ist

$$|\Phi'\rangle = |u_{+z}\rangle.$$

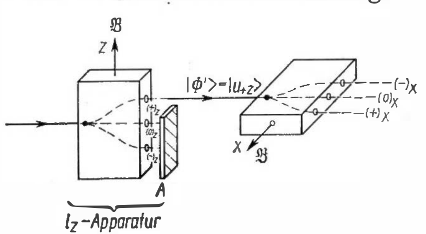


Fig. 52. Zwei STERN-GERLACH-Apparaturen: Nach ℓ_z-Messung Wahrscheinlichkeitsaussagen über ℓ_x-Messung

[1]) Sind die Eigenwerte Λ nicht auf einer Achse, sondern in einem mehrdimensionalen (reellen) Raum angeordnet, so ist das Integral (37) über einem Bereich dieses Raumes auszuführen.

In der zweiten Apparatur weist das Magnetfeld in x-Richtung, es liegt eine Meßapparatur vor, die ℓ_x mißt. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein bestimmter der drei Meßwerte $(+)_x$, $(0)_x$, $(-)_x$ von ℓ_x eintritt (gestrichelte Linien in Fig. 52) ist nach Gl. (35) durch die Skalarprodukte von $|\Phi'\rangle$ mit den Eigenvektoren $|u_{+x}\rangle$, $|u_{0x}\rangle$, $|u_{-x}\rangle$ von ℓ_x gegeben

$$\begin{aligned} w_{+x} &= |\langle u_{+x} | \Phi'\rangle|^2 = |\langle u_{+x} | u_{+z}\rangle|^2, \\ w_{0x} &= |\langle u_{0x} | \Phi'\rangle|^2 = |\langle u_{0x} | u_{+z}\rangle|^2, \\ w_{-x} &= |\langle u_{-x} | \Phi'\rangle|^2 = |\langle u_{-x} | u_{+z}\rangle|^2. \end{aligned}$$

Die zahlenmäßige Auswertung erfolgt in Aufg. 101. — Würde man die zweite Meßapparatur ebenfalls in die z-Richtung stellen, so läge nur eine Wiederholung der ursprünglichen Messung vor, und man erhielte mit Sicherheit wieder den Meßwert $(+)_z$

$$w_{+z} = 1, \ w_{0z} = 0, \ w_{-z} = 0.$$

Aufg. 64: Wie lautet die Wahrscheinlichkeit w_Λ, wenn der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ durch seine Komponenten $\Phi(k)$ in irgendeiner Basis $|v_k\rangle$ gegeben ist?

Aufg. 65: Bei einer Ortsmessung sei ein Teilchen in einem infinitesimalen Intervall $x \cdots x + \Delta x$ angetroffen worden. Wie lautet die Wahrscheinlichkeit w_E für die Messung eines (diskreten) Energie-Eigenwertes E? Was ergibt sich umgekehrt nach der Messung des Wertes E als Wahrscheinlichkeit $w_{x \cdots x+\Delta x}$ für das Auffinden des Teilchens im Intervall $x \cdots x + \Delta x$? Man vergleiche die beiden Wahrscheinlichkeiten.

Aufg. 66: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein Eigenwert Λ bei einer Messung von $\mathscr{L}$ *nicht* gemessen wird?

§ 6. Die Verträglichkeit zweier Messungen

Mißt man eine Observable $\mathscr{L}$ und unmittelbar danach eine andere Observable $\mathscr{M}$, so macht i. allg. die zweite Messung das Resultat der ersten zunichte. Ist dies nicht der Fall, so nennt man die Observablen $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ „*verträglich*" oder „*gleichzeitig meßbar*". Es darf also das Resultat Λ der Messung von $\mathscr{L}$ durch die folgende Messung von $\mathscr{M}$ nicht verändert werden; d. h., wiederholt man nach der $\mathscr{M}$-Messung nochmals die $\mathscr{L}$-Messung, so muß sich als Resultat mit *Sicherheit* wieder der ursprüngliche Meßwert Λ einstellen. Ist hingegen $\mathscr{L}$ mit $\mathscr{M}$ nicht verträglich, so ergibt sich bei der zweiten Messung von $\mathscr{L}$ irgendein Eigenwert $\bar{\Lambda}$ mit einer Wahrscheinlichkeit $w_{\bar{\Lambda}}$.

$$\begin{array}{llllllll} \text{Messung:} & & \mathscr{L} & & \mathscr{M} & & \mathscr{L} & \\ \text{Zustand:} & |\Phi\rangle & \to & |u_\Lambda\rangle & \to & |v_M\rangle & \to & |u_{\bar{\Lambda}}\rangle. \\ \text{Meßwert:} & & \Lambda & & M & & \bar{\Lambda} & \end{array}$$

Im Falle der Verträglichkeit von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ ist also notwendig, daß sich im Zustand $|v_M\rangle$ bei einer Messung von $\mathscr{L}$ mit Sicherheit wieder der Eigenwert $\bar{\Lambda} = \Lambda$ ergibt. Nach Gl. (29) muß daher $|v_M\rangle$ auch Eigenvektor von $\mathscr{L}$ zum Eigenwert Λ sein. Sind die Eigenwerte nicht entartet, so heißt das

$$|v_M\rangle = |u_\Lambda\rangle. \tag{40}$$

Da die Verträglichkeit für alle Meßwerte erfüllt sein soll, müssen also die Operatoren $\mathscr{M}$ und $\mathscr{L}$ dieselben Eigenvektoren besitzen (Fig. 39). Hieraus folgt nach 2.3 § 4, daß die Operatoren *vertauschbar* sein müssen,

$$\boxed{\mathscr{L}\,\mathscr{M} = \mathscr{M}\,\mathscr{L}}\,. \tag{41}$$

Wie dort gezeigt wurde, folgt umgekehrt aus Gl. (41) auch wieder Gl. (40).

Ist der Eigenwert Λ des Operators $\mathscr{L}$ *entartet*, so liegt nach seiner Messung der Zustandsvektor im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ (§ 4). Wird nun eine mit $\mathscr{L}$ vertauschbare Größe $\mathscr{M}$ gemessen, so kann sich nur ein Eigenwert M einstellen, dessen Eigenvektoren in $\mathfrak{u}_\Lambda$ liegen (die anderen Eigenvektoren von $\mathscr{M}$ stehen senkrecht auf $\mathfrak{u}_\Lambda$ und liefern daher die Wahrscheinlichkeit Null). Ist dieser Eigenwert M nicht entartet, so nimmt nach seiner Messung der Zustandsvektor $|\Phi'\rangle$ in $\mathfrak{u}_\Lambda$ die Richtung des Eigenvektors $|u_\Lambda^M\rangle$ von $\mathscr{M}$ an (Fig. 53).

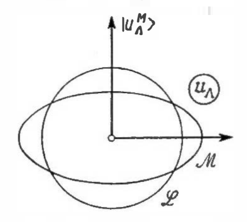


Fig. 53. Der Operator $\mathscr{M}$ im Eigenraum des entarteten Operators $\mathscr{L}$

Es gilt allgemein: *Die notwendige und hinreichende Bedingung für die Verträglichkeit zweier Observabler ist die Vertauschbarkeit ihrer Operatoren, die dann einen gleichen Satz von Eigenvektoren besitzen.*

An dieser Stelle wollen wir den *Beweis* der Gl. (34) nachholen, die die Richtung des Zustandsvektors $|\Phi'\rangle$ nach Messung eines entarteten Eigenwertes Λ von $\mathscr{L}$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ festlegt. Dazu betrachten wir einen mit $\mathscr{L}$ vertauschbaren HERMITEschen Operator $\mathscr{M}$, dessen Eigenvektoren $|u_\Lambda^M\rangle$ in $\mathfrak{u}_\Lambda$ zu nichtentarteten Eigenwerten M gehören. Ausgehend von einem beliebigen Zustand $|\Phi\rangle$ messen wir nun einerseits zunächst die Observable $\mathscr{L}$ mit dem entarteten Meßwert Λ, so daß nach Ausführung dieser Messung der Zustandsvektor $|\Phi'\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ liegt,

$$|\Phi'\rangle = \sum_M |u_\Lambda^M\rangle\, c_\Lambda^M,$$

und fragen *dann* nach der Wahrscheinlichkeit

$$w'_M = |\langle u_\Lambda^M \mid \Phi'\rangle|^2 = |c_\Lambda^M|^2$$

für das Eintreten des Meßwertes M bei Messung von $\mathscr{M}$. Andererseits bestimmen wir mit dem Ausgangszustand $|\Phi\rangle$ direkt — also ohne Zwischenschaltung einer $\mathscr{L}$-Messung — die Wahrscheinlichkeit

$$w_M = |\langle u_\Lambda^M \mid \Phi\rangle|^2$$

für denselben Meßwert,

$$|\Phi\rangle \xrightarrow[\Lambda]{\mathscr{L}} |\Phi'\rangle \xrightarrow[M]{\mathscr{M}} |u_\Lambda^M\rangle .$$
$$\underbrace{\qquad\qquad}_{\substack{\mathscr{M}\\ M}}$$

Macht man nun die plausible *Annahme* (!), *daß sich die Relativwahrscheinlichkeiten* für das Eintreffen der möglichen M-Werte *durch das Messen der vertauschbaren Observablen* $\mathscr{L}$ *nicht verändern*,

$$w'_M = a\, w_M , \tag{42}$$

so erhält man

$$|c_\Lambda^M|^2 = a\, |\langle u_\Lambda^M \mid \Phi\rangle|^2$$

oder

$$c_\Lambda^M = \sqrt{a}\, \langle u_\Lambda^M \mid \Phi\rangle . \tag{43}$$

Für den Vektor $|\Phi'\rangle$ heißt dies, daß man seine Richtung gerade durch *Projektion von* $|\Phi\rangle$ *auf den Eigenraum* $\mathfrak{u}_\Lambda$ erhält, q. e. d. Diese Projektion ist unabhängig von den gewählten Eigenvektoren $|u_\Lambda^M\rangle$ in $\mathfrak{u}_\Lambda$ (vgl. Aufg. 47).

§ 7. Nichtverträgliche Observable

Für zwei HERMITEsche Operatoren $\mathscr{F}$ und $\mathscr{G}$, die *nicht vertauschbar* sind,

$$\mathscr{F}\mathscr{G} - \mathscr{G}\mathscr{F} \neq \mathscr{O} , \tag{44}$$

gibt es *kein vollständiges Orthogonalsystem von Vektoren, das die gemeinsamen Eigenvektoren von* $\mathscr{F}$ *und* $\mathscr{G}$ *darstellt.* Gäbe es nämlich ein solches, so müßte wegen der Spektraldarstellungen

$$\mathscr{F} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_F F\, \mathscr{P}_{|u_F\rangle}\, \mathrm{d}F, \qquad \mathscr{G} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_G G\, \mathscr{P}_{|u_G\rangle}\, \mathrm{d}G$$

in

$$\mathscr{F}\mathscr{G} - \mathscr{G}\mathscr{F} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_F \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_G F\, G (\mathscr{P}_{|u_F\rangle}\mathscr{P}_{|u_G\rangle} - \mathscr{P}_{|u_G\rangle}\mathscr{P}_{|u_F\rangle})\, \mathrm{d}F\, \mathrm{d}G$$

jedes Glied der Klammer verschwinden, im Widerspruch zu (44)[1].

Es ist also i. allg. unmöglich, die Observablen $\mathscr{F}$ *und* $\mathscr{G}$, *die nicht vertauschbar sind, gleichzeitig zu messen.* Mißt man nämlich $\mathscr{F}$, dann wird $|\Phi\rangle$ durch die Messung zu einem Eigenvektor von $\mathscr{F}$, aber nicht gleichzeitig Eigenvektor von $\mathscr{G}$. Für eine unmittelbar darauffolgende Messung von $\mathscr{G}$ kann man den sich einstellenden Meßwert G nur mit der Wahrscheinlichkeit

$$w_G = |\langle u_G \mid u_F\rangle|^2 \tag{45}$$

vorhersagen, die Meßwerte G *streuen.*[2]) Hat man andererseits einen bestimmten

---

[1]) Gl. (44) erlaubt jedoch, daß *einzelne* Eigenvektoren von $\mathscr{F}$ auch Eigenvektoren von $\mathscr{G}$ sind.

[2]) Wegen der Symmetrie von $|\langle u_G \mid u_F\rangle|^2$ ist dieser Ausdruck auch die Wahrscheinlichkeit w_F, nach einer $\mathscr{G}$-Messung bei einer Messung von $\mathscr{F}$ den Wert F zu erhalten.

Wert G durch Messung erhalten, so wird dadurch das ursprüngliche Meßresultat von $\mathscr{F}$ *wieder zunichte;* denn dann ist $|\Phi\rangle = |u_G\rangle$ geworden, und eine nachfolgende Messung von $\mathscr{F}$ ergibt nicht wieder mit Sicherheit den früheren F-Wert. Fig. 54 veranschaulicht dies: Die $\mathscr{F}$- und $\mathscr{G}$-Ellipsen liegen im Gegensatz zu Fig. 39 „schief", d. h., ihre Eigenvektoren sind nicht orthogonal.

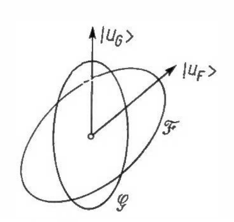


Fig. 54. Nichtvertauschbare Operatoren $\mathscr{F}$ und $\mathscr{G}$

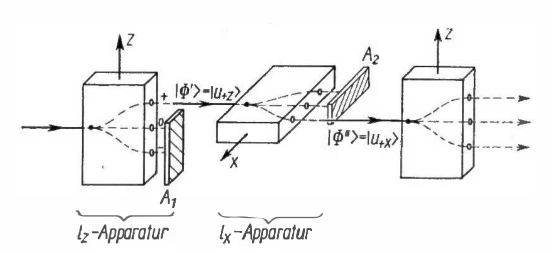


Fig. 55. Die ℓ_x-Messung macht das Ergebnis der ersten ℓ_z-Messung zunichte

Diesen Sachverhalt wollen wir wieder am Beispiel von Drehimpulsmessungen klarmachen. Wir schalten drei STERN-GERLACH-Apparaturen hintereinander (Fig. 55). Das Magnetfeld der ersten und dritten weise in z-Richtung, das der zweiten in x-Richtung. Es wird also zuerst ℓ_z, dann ℓ_x und dann wieder ℓ_z gemessen. Durch die erste Apparatur erfolgt die Präparation

$$|\Phi'\rangle = |u_{+z}\rangle .$$

Von den drei Möglichkeiten, die der Drehimpuls ℓ_x in der zweiten Meßapparatur besitzen kann, wird durch den Absorber A_2 nur der Zustand $|u_{+x}\rangle$ erlaubt. Es wird

$$|\Phi''\rangle = |u_{+x}\rangle .$$

Schickt man jetzt das Teilchen in die dritte Apparatur, so lauten die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten der drei möglichen Eigenwerte von ℓ_z,

$$\begin{aligned} w_{+z} &= |\langle u_{+z} | \Phi''\rangle|^2 = |\langle u_{+z} | u_{+x}\rangle|^2, \\ w_{0z} &= |\langle u_{0z} | \Phi''\rangle|^2 = |\langle u_{0z} | u_{+x}\rangle|^2, \\ w_{-z} &= |\langle u_{-z} | \Phi''\rangle|^2 = |\langle u_{-z} | u_{+x}\rangle|^2. \end{aligned}$$

Man kann also über den Ausgang der zweiten Messung von ℓ_z wiederum nur Wahrscheinlichkeitsvorhersagen machen, obwohl man früher bereits einmal eine ℓ_z-Messung vorgenommen hat. Durch die Nichtvertauschbarkeit von ℓ_x mit ℓ_z wird nämlich das Ergebnis dieser ersten Messung zunichte gemacht. Die Messung von ℓ_x bedeutet, daß die Wahrscheinlichkeit für die zweite ℓ_z-Messung mit $|\Phi''\rangle = |u_{+x}\rangle$ zu berechnen ist, das Ergebnis der ersten ℓ_z-Messung $|\Phi'\rangle = |u_{+z}\rangle$ spielt keine Rolle mehr.

§ 8. Die Unschärferelationen

Sind zwei Observable nicht verträglich, d. h. ihre Operatoren $\mathscr{F}$ und $\mathscr{G}$ nicht vertauschbar, so existiert i. allg. *kein Zustand, für den die Streuung von $\mathscr{F}$ und jene von $\mathscr{G}$ gleichzeitig Null ist.* Es muß also eine Beziehung zwischen den Unschärfen ΔF und ΔG bestehen, die das gleichzeitige Verschwinden von ΔF und ΔG ausschließt, die *Unschärferelation.*

Zur Herleitung dieser Relation erinnern wir uns (§ 3), daß die Streuung von $\mathscr{F}$ bzw. von $\mathscr{G}$ durch die (HERMITEschen) Operatoren

$$f = \mathscr{F} - \langle \mathscr{F} \rangle \, 1, \quad g = \mathscr{G} - \langle \mathscr{G} \rangle \, 1 \tag{46}$$

gegeben ist

$$\operatorname{Str} \mathscr{F} = \| f \Phi \|^2, \quad \operatorname{Str} \mathscr{G} = \| g \Phi \|^2. \tag{47}$$

Für die weitere Abschätzung benötigen wir die sogenannte SCHWARZsche Ungleichung für irgendwelche Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$,

$$\|\varphi\| \cdot \|\chi\| \geqq |\langle \varphi \mid \chi \rangle|. \tag{48}$$

Diese im Reellen selbstverständliche Beziehung ($\cos \leqq 1$!) läßt sich auch leicht im unitären Raum beweisen. Für irgend zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ definieren wir durch

$$|\chi\rangle = \frac{|\varphi\rangle \langle \varphi \mid \chi \rangle}{\|\varphi\|^2} + |\sigma\rangle \tag{49}$$

einen Vektor $|\sigma\rangle$, der orthogonal zu $|\varphi\rangle$ ist

$$\langle \varphi \mid \sigma \rangle = 0$$

(vgl. Fig. 56). Berechnet man aus Gl. (49) $\langle \chi \mid \chi \rangle$, so ergibt sich

$$\|\chi\|^2 = \frac{|\langle \varphi \mid \chi \rangle|^2}{\|\varphi\|^2} + \|\sigma\|^2, \tag{50}$$

woraus sofort die SCHWARZsche Ungleichung (48) folgt. Das Gleichheitszeichen gilt in ihr nur dann, wenn $|\sigma\rangle = 0$ ist, d. h., falls $|\chi\rangle$ mit $|\varphi\rangle$ parallel ist, $|\chi\rangle = \alpha \, |\varphi\rangle$.

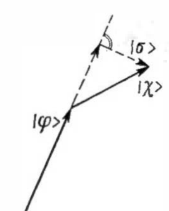


Fig. 56. Zur Herleitung der SCHWARZschen Ungleichung

Durch Anwendung der SCHWARZschen Ungleichung auf Gl. (47) findet man

$$\begin{aligned} \operatorname{Str} \mathscr{F} \cdot \operatorname{Str} \mathscr{G} &= \| f \Phi \|^2 \cdot \| g \Phi \|^2 \geqq |\langle f \Phi \mid g \Phi \rangle|^2 \\ &= \langle f \Phi \mid g \Phi \rangle \langle g \Phi \mid f \Phi \rangle = \langle \Phi \mid f g \, \Phi \rangle \langle \Phi \mid g f \, \Phi \rangle \\ &= \langle f g \rangle \langle g f \rangle. \end{aligned} \tag{51}$$

Zerlegt man die Operatoren fg und gf in die beiden HERMITEschen Operatoren $\frac{1}{2}(fg + gf)$ und $\frac{1}{2\mathrm{i}}(fg - gf)$,

$$\begin{aligned} fg &= \frac{fg + gf}{2} + \mathrm{i} \, \frac{fg - gf}{2\mathrm{i}} \\ gf &= \frac{fg + gf}{2} - \mathrm{i} \, \frac{fg - gf}{2\mathrm{i}}, \end{aligned} \tag{52}$$

so geht (51) in die Ungleichung

$$\text{Str}\,\mathcal{F}\cdot\text{Str}\,\mathcal{G}\geqq\left(\frac{\langle fg+gf\rangle}{2}\right)^2+\left(\frac{\langle fg-gf\rangle}{2\mathrm{i}}\right)^2 \tag{53}$$

über. Vermöge der Definition (46) erhält man z. B.

$$\langle fg\rangle=\langle(\mathcal{F}-\langle\mathcal{F}\rangle 1)(\mathcal{G}-\langle\mathcal{G}\rangle 1)\rangle=\langle\mathcal{F}\mathcal{G}\rangle-\langle\mathcal{F}\rangle\langle\mathcal{G}\rangle,$$

so daß sich aus (53) ergibt

$$\text{Str}\,\mathcal{F}\cdot\text{Str}\,\mathcal{G}\geqq\left(\frac{\langle\mathcal{F}\mathcal{G}+\mathcal{G}\mathcal{F}\rangle}{2}-\langle\mathcal{F}\rangle\langle\mathcal{G}\rangle\right)^2+\left(\frac{\langle\mathcal{F}\mathcal{G}-\mathcal{G}\mathcal{F}\rangle}{2\mathrm{i}}\right)^2. \tag{54}$$

Läßt man den ersten quadratischen Ausdruck weg, so ergibt sich als untere Schranke von $\Delta F\cdot\Delta G$ der Erwartungswert des Kommutators zwischen $\mathcal{F}$ und $\mathcal{G}$,

$$\boxed{\Delta F\cdot\Delta G\geqq\left|\frac{1}{2\mathrm{i}}\langle[\mathcal{F},\mathcal{G}]\rangle\right|}\qquad \textit{Unschärferelation.} \tag{55}$$

Mittels der Vertauschungsrelationen zwischen Ort- und Impulsoperatoren [Gl. (3.2–10)] sind damit die bekannten Unschärferelationen

$$\Delta p_i\cdot\Delta x_k\geqq\frac{\hbar}{2}\,\delta_{ik} \tag{56}$$

im Rahmen derQuantentheorie hergeleitet. Die Vertauschungsrelationen 3.2 § 3 u. 6 führen uns auf die Unschärferelationen

$$\Delta F\cdot\Delta x_i\geqq\frac{\hbar}{2}\left|\left\langle\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial p_i}\right\rangle\right|;\qquad \Delta F\cdot\Delta p_i\geqq\frac{\hbar}{2}\left|\left\langle\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial x_i}\right\rangle\right|, \tag{57}$$

$$\Delta E\cdot\Delta F\geqq\frac{\hbar}{2}\,|\langle\mathring{\mathcal{F}}\rangle|\qquad\left(\text{falls }\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}=0\right), \tag{58}$$

$$\Delta l_1\cdot\Delta l_2\geqq\frac{\hbar}{2}\,|\langle\ell_3\rangle|. \tag{59}$$

Aufg. 67: Welche Bedingung muß $|\Phi\rangle$ erfüllen, damit in der Unschärferelation (55) das Gleichheitszeichen steht?

Aufg. 68: Welche Unschärferelation besteht zwischen ΔE und Δx bzw. Δp?

Viertes Kapitel

Der unitäre Raum eines quantenmechanischen Systems

§ 1. Ein vollständiger Satz verträglicher Observabler

Die Nichtvertauschbarkeit zweier Operatoren bringt die nicht gleichzeitige, scharfe Meßbarkeit der zugehörigen physikalischen Observablen zum Ausdruck. Der Zustand eines quantenmechanischen Systems ist damit nicht wie in der klassischen Physik durch die genaue Angabe der Meßwerte aller Observabler

festzulegen. Es ist vielmehr so, daß der Zustand des Systems durch die gleichzeitige Messung eines „*vollständigen*“ *Satzes verträglicher Observabler* völlig bestimmt wird; eine genauere Festlegung ist quantentheoretisch unmöglich. Was man unter einem vollständigen Satz vertauschbarer Operatoren versteht, werde nun erklärt.

Ist ein Eigenwert Λ einer Observablen $\mathscr{L}$ nicht entartet, so wird durch die Messung dieser Observablen bei Einstellung des Meßwertes Λ der Zustand nach der Messung eindeutig (bis auf einen physikalisch uninteressanten Phasenfaktor) festgelegt: $|\Phi'\rangle = |u_\Lambda\rangle$. Besitzt ein Operator $\mathscr{L}$ lauter einfache Eigenwerte, so nennt man die Observable „*vollständig*“ (oder auch „maximal“), weil durch ihre Messung der Zustand des quantenmechanischen Systems vollständig festgelegt wird — eine darüber hinausgehende, genauere Information über den Zustand des Systems erlaubt die Quantentheorie nicht.

Sind die Eigenwerte des Operators $\mathscr{L}$ nicht alle einfach, so wird nach Gl. (3.3–34) durch die Messung eines seiner *entarteten* Eigenwerte Λ der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ auf den zugehörigen Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ projiziert. Die Richtung des entstehenden Zustandsvektors $|\Phi'\rangle$ im Eigenraum hängt also von der Richtung von $|\Phi\rangle$ vor der Messung ab. Kennt man diese Richtung aber nicht, d. h., hat man nicht bereits früher eine vollständige Observable gemessen, so weiß man nach der Messung von Λ nichts über die Richtung von $|\Phi'\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ [es liegt ein „Gemisch“ vor (vgl. Kap. 3.7)]. Zur genaueren Festlegung von $|\Phi'\rangle$ ist es dann nötig, neben der Observablen $\mathscr{L}$ noch eine weitere, mit $\mathscr{L}$ verträgliche Observable $\mathscr{M}$ zu messen ($[\mathscr{L}, \mathscr{M}] = \mathscr{O}$). Sind die simultanen Eigenräume von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ alle eindimensional, so legt die gleichzeitige Messung von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ den Zustandsvektor eindeutig fest: $|\Phi'\rangle = |u_{\Lambda M}\rangle$. Wir nennen die *beiden* verträglichen Observablen $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ dann einen *vollständigen* Satz von Observablen; ihre simultane Messung hat dieselbe Wirkung wie die Messung eines nichtentarteten Operators.

Sind die simultanen Eigenräume von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{M}$ jedoch noch nicht eindimensional, so sind noch weitere, *vertauschbare* Operatoren $\mathscr{N}, \ldots$ hinzuzufügen,

$$\begin{aligned} [\mathscr{L}, \mathscr{M}] = [\mathscr{L}, \mathscr{N}] = \cdots &= \mathscr{O}, \\ [\mathscr{M}, \mathscr{N}] = \cdots &= \mathscr{O}, \\ \ddots \quad &, \end{aligned} \tag{1}$$

bis schließlich die simultanen Eigenräume all dieser Operatoren eindimensional sind. Durch die gleichzeitige Messung eines solchen *vollständigen Satzes verträglicher Operatoren* wird der Zustand des Systems vollständig bestimmt,

$$|\Phi'\rangle = |u_{\Lambda M N \ldots}\rangle. \tag{2}$$

Ob ein Satz vertauschbarer Operatoren vollständig ist, hängt natürlich von der Dimension des verwendeten unitären Vektorraumes ab, d. h. von der „Anzahl“ linear unabhängiger Basisvektoren $|v_k\rangle$, durch die ein beliebiger Vektor $|\Phi\rangle$ des Raumes dargestellt werden kann.

§ 2. Konstruktion des unitären Raumes $\mathfrak{U}$ eines physikalischen Systems

In allen bisherigen Überlegungen gingen wir von der Vorstellung aus, daß der unitäre Raum $\mathfrak{U}$ des betrachteten physikalischen Systems, d. h. seine Dimension und die Vollständigkeit seiner Basisvektoren, vorgegeben sei. Wir wollen nun erläutern, wie man diesen Raum $\mathfrak{U}$ eines bestimmten vorgegebenen physikalischen Systems konstruiert: Wir gehen davon aus, daß die Vertauschungsrelationen zwischen den HERMITEschen Operatoren der physikalischen Observablen des Systems bereits vorliegen (vgl. Kap. 3.2). *Greift man einen Satz von Operatoren $\mathscr{L}$, $\mathscr{M}$, $\mathscr{N}$, ... heraus, die nach diesen Vertauschungsrelationen kommutativ sind, und gibt es keine weiteren, unabhängigen*[1]) *Operatoren, die mit diesen vertauschbar sind, so bilden diese Operatoren bezüglich des betrachteten physikalischen Problems einen vollständigen Satz verträglicher Observabler* (vgl. z. B. Kap. 4.1). Die Forderung, daß ein solcher Satz von Observablen vollständig ist, bedeutet, daß der dem speziellen physikalischen System zugeordnete *unitäre Raum* $\mathfrak{U}$ *aus den Eigenvektoren* $|u_{\Lambda MN\ldots}\rangle$ *dieser Operatoren aufgebaut werden kann.*[2]) — *Die Eigenvektoren ihrererseits werden durch die nichtvertauschbaren Observablen festgelegt* [wie dies in speziellen Fällen geschieht, werden wir im Teil 4 sehen]. Normiert man diese Vektoren auf eins bzw. auf die δ-Funktion, so bilden sie ein *vollständiges, orthonormiertes System von Basisvektoren*, nach denen sich ein beliebiger Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ des Systems entwickeln läßt,

$$|\Phi\rangle = \sum_{\Lambda, M, N\cdots}\!\!\!\!\!\!\int \; |u_{\Lambda MN\ldots}\rangle \langle u_{\Lambda MN\ldots}|\Phi\rangle \, d\Lambda \, dM \, dN \cdots \tag{3}$$

(„$\mathscr{L}$, $\mathscr{M}$, $\mathscr{N}$, ...-Darstellung" des unitären Raumes).

Der zu wählende unitäre Raum $\mathfrak{U}$ hängt also wesentlich von der speziellen Struktur des betrachteten physikalischen Systems ab. Man muß eben wissen, welches System — z. B. Elektronen oder/und Photonen oder etwa nur ein Spinsystem (4.3 § 4) — man untersuchen will, oder genauer gesagt, welcher Teil des Universums am speziellen Experiment wesentlich beteiligt ist.

Ein ähnliches Problem liegt bereits in der klassischen Mechanik vor, in der man auch von vornherein wissen muß, wie viele Freiheitsgrade f das betrachtete System hat, um die Dimension des klassischen Konfigurationsraumes $(x_1, \ldots, x_f)$ bzw. jene des Phasenraumes $(x_1, \ldots, x_f, p_1, \ldots, p_f)$ angeben zu können. Auf den Zusammenhang zwischen der Anzahl der Freiheitsgrade und der Struktur des quantentheoretischen unitären Raumes kommen wir in 4.1 § 6 zurück.

§ 3. Die Systemzusammensetzung[3])

Für die Behandlung eines quantenmechanischen Systems, das aus Teilsystemen — z. B. aus mehreren (verschiedenen) Teilchen — zusammengesetzt

[1]) Das heißt, solche, die nicht eine Funktion $\mathscr{F}(\mathscr{L}, \mathscr{M}, \mathscr{N}, \ldots)$ sind.

[2]) Es besteht nach den Vertauschungsrelationen kein physikalischer Grund, einen größeren Raum zu verwenden.

[3]) Dieser Paragraph setzt insbesondere die Kenntnis von Kap. 2.4 voraus.

ist, zwischen denen eine Wechselwirkung besteht, ist es häufig zweckmäßig, von den unabhängigen Teilsystemen auszugehen. Der übersichtlicheren Schreibweise wegen beschränken wir uns hier speziell auf ein System, das sich aus zwei Teilsystemen zusammensetzt. Die Erweiterung auf mehrere Teilsysteme bietet keine zusätzlichen Schwierigkeiten.

Damit die Teilsysteme (1) und (2) unabhängig sind, müssen *alle* Observablen $\mathscr{L}^1$ von (1) mit *allen* Observablen $\mathscr{M}^2$ von (2) verträglich sein,

$$[\mathscr{L}^1, \mathscr{M}^2] = \mathcal{O}. \tag{4}$$

Die Observablen $\mathscr{L}^1$ sollen *für sich* durch ihre Vertauschungsrelationen nach § 2 einen unitären Raum $\mathfrak{U}^1$ für das System (1) definieren: Die Eigenvektoren $|u^1_\Lambda\rangle$ eines vollständigen Satzes vertauschbarer Operatoren des Systems (1) spannen $\mathfrak{U}^1$ auf. Entsprechend mögen die Observablen $\mathscr{M}^2$ des Systems (2) für sich einen Raum $\mathfrak{U}^2$ definieren, der durch die Eigenvektoren $|u^2_M\rangle$ eines vollständigen Satzes vertauschbarer Operatoren aus (2) aufgebaut wird.

Betrachtet man das aus den Teilsystemen (1) und (2) zusammengesetzte System — das Observable $\mathscr{F}$ $(\mathscr{L}^1, \mathscr{M}^2)$ besitzt, die von allen $\mathscr{L}^1$ *und* $\mathscr{M}^2$ abhängen können —, so wird dieses im Produktraum

$$\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \tag{5}$$

quantentheoretisch beschrieben, der nach 2.4 § 1 durch die direkten Produkte der Basisvektoren von $\mathfrak{U}^1$ und $\mathfrak{U}^2$ aufgespannt wird,

$$|u^1_\Lambda u^2_M\rangle = |u^1_\Lambda\rangle\, |u^2_M\rangle. \tag{6}$$

Ein beliebiger Zustand des zusammengesetzten Systems wird durch den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$, der irgendeine Richtung in $\mathfrak{U}$ haben kann, erfaßt,

$$\boxed{|\Phi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda}\; \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{M} |u^1_\Lambda u^2_M\rangle\, \Phi(\Lambda, M)\, \mathrm{d}\Lambda\, \mathrm{d}M}\,. \tag{7}$$

Mit ihm lassen sich alle Wahrscheinlichkeitsaussagen über das zusammengesetzte System machen (vgl. etwa 4.1 § 6).

Unter den Observablen $\mathscr{F}$ des zusammengesetzten Systems sind auch die Observablen $\mathscr{L}^1$ des Teilsystems (1) — für die man in $\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$ auch $\mathscr{L}^1 \times \mathit{1}$ schreibt (2.4 § 2) — und die Observablen $\mathscr{M}^2$ (bzw. $\mathit{1} \times \mathscr{M}^2$) des Teilsystems (2) enthalten. Projiziert man den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ insbesondere auf den Vektor $|u^1_\Lambda u^2_M\rangle$, so ergibt

$$|\langle u^1_\Lambda u^2_M \,|\, \Phi\rangle|^2 = |\Phi(\Lambda, M)|^2 \tag{8}$$

die Wahrscheinlichkeit (bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte) dafür, daß bei einer gleichzeitigen Messung von $\mathscr{L}^1$ und $\mathscr{M}^2$ sich die Meßwerte Λ und M ergeben.

Summiert bzw. integriert man über alle möglichen Werte von M, so ist

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_M |\Phi(\Lambda, M)|^2 \, \mathrm{d}M \tag{9}$$

die Wahrscheinlichkeit (bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte) dafür, daß sich der Meßwert Λ und gleichzeitig irgendein Wert aus dem $\mathscr{M}^2$-Spektrum ergibt [vgl. Gl. (3.3–39)].

Als wichtiges *Beispiel* für die Systemzusammensetzung betrachten wir zwei wechselwirkende Systeme, deren HAMILTON-Operator sich additiv aus den HAMILTON-Operatoren $\hbar^1$ und $\hbar^2$ unabhängiger Teilsysteme (1) und (2) und einer Wechselwirkung $\hbar^{12}$ zusammensetzt,

$$\mathscr{H} = \hbar^1 + \hbar^2 + \hbar^{12}.\ ^{1)} \tag{10}$$

Wir können dabei z. B. an zwei Teilchen (verschiedener Masse) denken, die sich in einem gemeinsamen Potential $\mathscr{V}$ befinden,

$$\hbar^1 = \frac{1}{2m^1}\,\vec{p}^{1\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}^1),$$

$$\hbar^2 = \frac{1}{2m^2}\,\vec{p}^{2\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}^2),$$

und zwischen denen als $\hbar^{12}$ etwa die COULOMBsche Wechselwirkungsenergie vorhanden ist.

Zunächst untersuchen wir jedoch das System (1, 2) ohne Wechselwirkung, so daß der HAMILTON-Operator lautet

$$\mathscr{H}_0 = \hbar^1 + \hbar^2. \tag{11}$$

Wir denken uns das Eigenwertproblem von $\hbar^1$ und $\hbar^2$ gelöst,

$$\hbar^1\,|u_a^1\rangle = \varepsilon_a^1\,|u_a^1\rangle, \quad \hbar^2\,|u_b^2\rangle = \varepsilon_b^2\,|u_b^2\rangle. \tag{12}$$

Für das Eigenwertproblem von $\mathscr{H}_0$ in $\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$,

$$\mathscr{H}_0\,|u_{E_0}\rangle = E_0\,|u_{E_0}\rangle, \tag{13}$$

erhalten wir mit dem Produktansatz

$$|u_{E_0}\rangle = |u_a^1 u_b^2\rangle \tag{14}$$

nach 2.4 § 2

$$\mathscr{H}_0\,|u_{E_0}\rangle = (\varepsilon_a^1 + \varepsilon_b^2)\,|u_{E_0}\rangle,$$

d. h.

$$E_0 = \varepsilon_a^1 + \varepsilon_b^2; \tag{15}$$

die Energie des Gesamtsystems ohne Wechselwirkung ist die Summe der Energien der Teilsysteme.

---

1) In der detaillierteren Schreibweise lautet dieser Operator

$$\mathscr{H} = \hbar^1 \times 1 + 1 \times \hbar^2 + \hbar^{12}. \tag{10*}$$

Zur Lösung des Eigenwertproblems des Gesamt-HAMILTON-Operators (10) mit Wechselwirkung,

$$\mathscr{H} \,|u_E\rangle = E \,|u_E\rangle, \tag{16}$$

können wir die Eigenvektoren $|u_E\rangle$ nach den Basisvektoren (14) von $\mathfrak{U}$ entwickeln,

$$\boxed{|u_E\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_b |u_a^1 u_b^2\rangle \, u_E(a, b)\, da\, db}\,. \tag{17}$$

Für die Berechnung des Eigenwertes E der Gesamtenergie und der Koeffizienten $u_E(a, b) = \langle u_a^1 u_b^2 \mid u_E\rangle$, die die Richtung des Gesamtenergieeigenvektors $|u_E\rangle$ gegen die Basisvektoren $|u_a^1 u_b^2\rangle$ angeben, bedient man sich verschiedener Näherungsverfahren, z. B. der SCHRÖDINGERschen Störungstheorie (vgl. Anhang Kap. 5.3).

Fünftes Kapitel[1])

Die Bewegungsgleichungen in der Quantentheorie

§ 1. Die Problemstellung der quantentheoretischen Dynamik

Die Rolle der Zeit in der Quantentheorie ist uns aus 3.2 § 5 schon bekannt: Sie ist ein c-Zahl-Parameter t, der angibt, zu welcher makroskopischen Zeit die makroskopische Meßapparatur eine Messung an dem mikroskopischen Objekt vornimmt.

In den Überlegungen des Kap. 3.3 betrachteten wir den Zustandsvektor und die Operatoren im unitären Raum zu einem *bestimmten* Zeitpunkt, etwa vor einer Messung. Ihre Lage gab uns Auskunft über die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von Meßergebnissen, wenn die Messung zu diesem Zeitpunkt an dem quantenmechanischen System ausgeführt wird.

Analog zur Fragestellung der klassischen Mechanik wollen wir uns jetzt dem Problem zuwenden: Zur Zeit t_0 sei durch Messung an dem quantenmechanischen System sein Zustand bestimmt worden. *Welche Wahrscheinlichkeitsaussagen können wir dann über den Ausgang einer Messung zu einem späteren Zeitpunkt $t > t_0$ machen, wenn das System in dem Zeitintervall $t_0 \cdots t$ nicht durch Messungen behelligt wird?* Diese Frage wird durch die *Bewegungsgleichungen* der Quantentheorie beantwortet, die im unitären Raum die Dynamik der Operatoren und des Zustandsvektors angeben. Diese wollen wir im folgenden aufsuchen.

---

[1]) Für den Anfänger ist es nützlich, vor dem Studium dieses Kapitels sich zunächst an Hand einiger Beispiele aus Teil 4 mit dem bisher Gelernten vertraut zu machen.

§ 2. Der Operator $\mathring{\mathscr{P}}_{|\Phi\rangle}$ und die Grundgleichungen der Dynamik

Im Rahmen der Quantisierung (3.2 § 1) wurden den Observablen L HERMITEsche Operatoren $\mathscr{L}$ zugeordnet. Insbesondere haben wir für den Operator, der die Observable „Zeitliche Veränderung der Observablen L" darstellt, $\mathring{\mathscr{L}}$ geschrieben, was aber nichts mit einer zeitlichen Differentiation des Operators $\mathscr{L}$ zu tun hat. Wie wir in 3.2 § 6 gesehen haben, besteht zwischen dem Operator $\mathring{\mathscr{L}}$ und dem Operator $\mathscr{L}$ der Zusammenhang

$$\boxed{\mathring{\mathscr{L}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{L}] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}}\,. \tag{1}$$

Dabei bedeutet $\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}$ die zeitliche Veränderung des Operators vermöge seiner evtl. vorhandenen *expliziten* Zeitabhängigkeit. Die Größen Ort, Impuls, Drehimpuls sind definitionsgemäß explizit zeitunabhängig.

Um nun auch den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ in diese allgemeine Beziehung mit einschließen zu können, betrachten wir den *statistischen Operator* $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ [Gl. (3.3–22)]. Dieser stellt als Projektionsoperator die Frage dar: „Wird das quantenmechanische System durch den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ beschrieben?", d. h., er behandelt *die Zuordnung zwischen System und Zustandsvektor*. Nach der statistischen Interpretation der Quantentheorie muß diese Zuordnung *immer* bestehen, die gestellte Frage ist stets mit Ja zu beantworten.

Der Frage „Verändert sich die Zuordnung vom System zum Zustandsvektor zeitlich?" kommt also die Antwort *Nein* zu. Der zugeordnete Operator $\mathring{\mathscr{P}}_{|\Phi\rangle}$ muß daher gleich dem Null-Operator sein, weil unmögliche Eigenschaften durch diesen beschrieben werden,

$$\boxed{\mathring{\mathscr{P}}_{|\Phi\rangle} = \mathscr{O}}\,.^{1)} \tag{2}$$

Diese Gleichung drückt also die dauernde Zuordnung des Zustandsvektors zum physikalischen System aus.

Wendet man die Relation (1) speziell auf den statistischen Operator $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ an, so erhält man

$$\boxed{\mathring{\mathscr{P}}_{|\Phi\rangle} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}] + \left(\frac{\partial \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathscr{O}}\,. \tag{3}$$

---

[1]) Auf die Analogie zur klassischen Phasenraumdichte ϱ, deren totale zeitliche Veränderung $\dot{\varrho}$ aus ähnlichen Gründen ebenfalls stets Null ist, gehen wir in Kap. 3.7 ein [vgl. insbesondere Gl. (3.7–49)].

Man ersieht aus dieser Gleichung, daß der statistische Operator wesentlich explizit zeitabhängig ist. [1])

Die explizite Veränderung der Operatoren $\mathscr{L}$ und $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ beinhaltet bereits die gesamte quantentheoretische Dynamik.

Neben der expliziten Zeitabhängigkeit, die ein wesentliches Charakteristikum eines Operators ist, haben wir in 3.2 § 7 noch eine weitere Zeitabhängigkeit kennengelernt, die man *jedem* Operator — also $\mathscr{L}$ *und* $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ — wegen der Unitäräquivalenz der Operatorrelationen *zusätzlich* willkürlich durch eine zeitabhängige unitäre Transformation $\mathscr{A}(t)$ aufprägen kann. In den auf diese Weise [Gl. (3.2–53)] gewonnenen ***totalen*** Zeitfunktionen $\mathscr{L}(t)$ und $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)$ ist dann durch den Beitrag der expliziten Zeitabhängigkeit ebenfalls die quantentheoretische Dynamik enthalten. *Man spricht von der Dynamik in einem bestimmten Bild.* Da die Operatorgleichungen (1) und (3) gegenüber unitären Transformationen invariant sind, gelten sie in jedem Bild,

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\mathscr{L}}(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}(t), \mathscr{L}(t)] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t), \\ \mathscr{O} &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}(t), \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)] + \left(\frac{\partial \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t). \end{aligned} \tag{4}$$

Während die totale Zeitabhängigkeit der Operatoren in den verschiedenen Bildern verschieden ausfällt, ergibt sich wegen der Unitär-Äquivalenz der Operatoren für die Erwartungswerte

$$\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \mathrm{Sp}\big(\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)\, \mathscr{L}(t)\big) \tag{5}$$

unabhängig vom Bild natürlich immer dasselbe Ergebnis (vgl. Aufg. 62).

Da die physikalischen Aussagen nur in Erwartungswerten liegen, ist damit im Prinzip keines der Bilder, die sich untereinander nur durch unitäre Transformationen unterscheiden, vor einem anderen Bild ausgezeichnet. Die Auswahl eines bestimmten Bildes (§ 6) kann jedoch mathematische Vorteile liefern, die z. B. bei einem speziellen Problem die Integration der Bewegungsgleichung erleichtern. Zum Teil hängt die getroffene Wahl auch nur von dem individuellen Geschmack des behandelnden Physikers ab.

Die *Anfangssituation*, bei der die dynamische Entwicklung (1) und (3) beginnt, wird durch den Ausgang der Messung irgendeiner Observablen $\mathscr{L}'$ zur Zeit t_0 festgelegt: Ergab sich bei dieser ein Meßwert Λ', so ist nach dem in 3.3 § 4 Gesagten zur Zeit t_0 der Zustandsvektor mit dem zu diesem Eigenwert gehörigen Eigenvektor $|u_{\Lambda'}\rangle$ identisch,

$$\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t_0) = \mathscr{P}_{|u_{\Lambda'}\rangle}. \tag{6}$$

[1]) Die Gl. (1) und (3) gelten nicht für ein Teilsystem und damit auch *nicht für den Meßprozeß*, solange man die Meßapparatur nicht in die Betrachtung mit einbezieht.

§ 3. Die quantentheoretischen Bewegungsgleichungen in einem beliebigen Bild

Es soll nunmehr die totale Zeitabhängigkeit in irgendeinem beliebigen, aber festen Bild näher untersucht werden. Dazu wollen wir Differentialgleichungen für die Zeitfunktion aufstellen, durch die

1. das Bild definiert werden kann,
2. die Dynamik der Operatoren $\mathscr{L}(t)$, ihrer Eigenvektoren $|u_\Lambda(t)\rangle$ und die des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$ angegeben wird,
   und aus denen
3. der Zusammenhang der Größen zwischen irgend zwei endlichen Zeiten t_0 und t ermittelt werden kann („Integration").

a) Die unitären Transformationen $\mathscr{A}(t, t_0)$ innerhalb eines Bildes

Die *vollständige* Zeitabhängigkeit der Operatoren in einem bestimmten Bild haben wir bereits in 3.2 § 7c kennengelernt: Der Zusammenhang der HERMITEschen Operatoren $\mathscr{L}$ zwischen zwei Zeiten t_0 und t wird einerseits durch eine unitäre Transformation $\mathscr{A}(t, t_0)$ und andererseits durch die explizite Zeitabhängigkeit bestimmt — sofern der betrachtete Operator $\mathscr{L}$ eine solche überhaupt besitzt.

Aus

$$x(t) = \mathscr{A}(t, t_0)\, x(t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0), \qquad p(t) = \mathscr{A}(t, t_0)\, p(t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0) \tag{7}$$

folgt für einen beliebigen Operator $\mathscr{L}$ [Gl. (3.2-60)]

$$\boxed{\mathscr{L}(t) = \mathscr{A}(t, t_0)\, \mathscr{L}\big(x(t_0),\ p(t_0),\ t\big)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0)}\ ,^{1)} \tag{8}$$

also auch für

$$\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t) = \mathscr{A}(t, t_0)\, \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}\big(x(t_0),\ p(t_0),\ t\big)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0). \tag{9}$$

Die relative Lage des Operators $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t_0)$ gegenüber den Operatoren $x(t_0)$ und $p(t_0)$ wird zur Zeit t_0 durch Messung (Präparation des Systems) bestimmt.

Zunächst mögen die unitären Operatoren $\mathscr{A}(t, t_0)$, die das Bild definieren, als bekannt vorausgesetzt werden. Sie erfüllen die Zusammensetzungsvorschrift [Gl. (3.2-57)]

$$\mathscr{A}(t, t_0) = \mathscr{A}(t, t_1)\, \mathscr{A}(t_1, t_0), \tag{10}$$

---

[1]) Um einen konkreten Fall vor Augen zu haben, setzen wir voraus, daß die Operatoren Funktionen der Orts- und Impulsoperatoren sind (3.2 § 3). Im allgemeinen tritt an die Stelle von x und p irgendein Satz unabhängiger Operatoren; z. B. sind zu $\vec{x}$ und $\vec{p}$ bei Berücksichtigung des Spins eines Teilchens noch die Spinoperatoren $\vec{\sigma}$ (4.3 § 4) hinzuzunehmen. In der Feldquantisierung fungieren die Feldoperatoren ψ_i als unabhängige Operatoren; alle anderen Operatoren sind dort Funktionale dieser.

so daß man die Transformationen (8) nacheinander ausführen kann. Mit

$$\mathscr{A}(t, t) = \mathbb{1} \tag{11}$$

folgt dann aus der Unitarität

$$\mathscr{A}^\dagger(t, t_0) = \mathscr{A}(t_0, t). \tag{12}$$

Ist der Operator $\mathscr{L}$ explizit zeitunabhängig, so erhält man für die Bewegung seiner Eigenvektoren [Gl. (3.2–51)]

$$|u_\Lambda(t)\rangle = \mathscr{A}(t, t_0)\, |u_\Lambda(t_0)\rangle. \tag{13}$$

Seine Eigenwerte Λ sind in diesem Fall zeitlich konstant [Gl. (3.2–52)]. Es ist zu beachten, daß für die Dynamik des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$ die Gl. (13) *nicht* gilt, weil $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)$ eine wesentliche explizite Zeitabhängigkeit besitzt. Wir werden jedoch für die totale Zeitabhängigkeit von $|\Phi(t)\rangle$ im Abschnitt d) eine entsprechende, andere Gleichung herleiten.

b) Die Festlegung der unitären Transformationen $\mathscr{A}$ durch einen Hermiteschen Operator $\mathscr{X}$

Es möge die *vollständige* zeitliche Veränderung

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}(t)}{\mathrm{d}t}$$

der Operatoren $\mathscr{L}(t)$ in dem betrachteten Bild untersucht werden.[1]) Durch gliedweises Differenzieren von Gl. (8) erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\mathscr{A}}{\mathrm{d}t}\mathscr{L}(x_0, p_0, t)\,\mathscr{A}^\dagger + \mathscr{A}\left(\frac{\partial\mathscr{L}(x_0, p_0, t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\mathscr{A}^\dagger + \mathscr{A}\,\mathscr{L}(x_0, p_0, t)\,\frac{\mathrm{d}\mathscr{A}^\dagger}{\mathrm{d}t}.$$

Im ersten Term schieben wir $\mathbb{1} = \mathscr{A}^\dagger\mathscr{A}$ ein und berücksichtigen im letzten die Differentiationsregel (2.2–32)

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}}{\mathrm{d}t} = \dot{\mathscr{A}}\,\mathscr{A}^\dagger\mathscr{A}\,\mathscr{L}(x_0, p_0, t)\,\mathscr{A}^\dagger + \mathscr{A}\left(\frac{\partial\mathscr{L}(x_0, p_0, t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\mathscr{A}^\dagger$$
$$- \mathscr{A}\,\mathscr{L}(x_0, p_0, t)\,\mathscr{A}^\dagger\dot{\mathscr{A}}\,\mathscr{A}^\dagger.$$

Kehren wir jetzt mittels Gl. (8) wieder zu $\mathscr{L}(t)$ und $\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t)$ zurück[2]), so finden wir für die totale Ableitung von $\mathscr{L}(t)$

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}(t)}{\mathrm{d}t} = [\dot{\mathscr{A}}\,\mathscr{A}^\dagger, \mathscr{L}(t)] + \left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t). \tag{14}$$

---

[1]) Diese totale Ableitung $\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}}{\mathrm{d}t}$ hat i. allg. weder etwas mit dem Operator $\mathring{\mathscr{L}}$ noch mit $\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}$ zu tun!

[2]) Es gilt nach Gl. (8)

$$\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t) = \mathscr{A}(t, t_0)\left(\frac{\partial\mathscr{L}(x_0, p_0, t)}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}\mathscr{A}^\dagger(t, t_0).$$

Wir definieren einen Operator $\mathscr{X}(t)$ durch die Gleichung

$$\mathscr{X}(t) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \dot{\mathscr{A}}(t, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0). \tag{15}$$

Dieser Operator ist HERMITEsch und unabhängig vom Zeitpunkt t_0.

Beweis: Weil die Differentiation mit der Adjunktion vertauschbar ist, erhalten wir

$$\mathscr{X}^\dagger = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathscr{A} \dot{\mathscr{A}}^\dagger = +\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathscr{A} \mathscr{A}^\dagger \dot{\mathscr{A}} \mathscr{A}^\dagger = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \dot{\mathscr{A}} \mathscr{A}^\dagger = \mathscr{X}.$$

Aus der Eigenschaft (10) folgt

$$\dot{\mathscr{A}}(t, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0) = \dot{\mathscr{A}}(t, t_1)\, \mathscr{A}(t_1, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_1) = \dot{\mathscr{A}}(t, t_1)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_1),$$

d. h., der Operator $\mathscr{X}$ kann nur von t abhängen.

$\mathscr{X}$ beschreibt eine *infinitesimale* unitäre Transformation für ein kleines Zeitintervall $\delta t = t - t_0$,

$$\mathscr{A}(\delta t) = 1 + \dot{\mathscr{A}}(t_0, t_0)\, \delta t = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathscr{X}(t_0)\, \delta t.$$

Bisher betrachteten wir die unitäre Transformation $\mathscr{A}(t, t_0)$ als vorgegeben und haben daraus $\mathscr{X}$ bestimmt. Wir wollen nun umgekehrt vorgehen und *durch Vorgabe eines* HERMITE*schen Operators* $\mathscr{X}$ *die Transformation* $\mathscr{A}(t, t_0)$ *definieren. Zu diesem Zweck identifiziert man* $\mathscr{X}$ *mit dem* HERMITE*schen Operator einer Observablen* $\mathscr{X}(x, p, t)$ (die die Dimension einer Energie haben muß). Für deren totale Zeitabhängigkeit ergibt sich dann nach Gl. (14) und (15)

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{X}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial \mathscr{X}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}, \tag{16}$$

d. h., die Zeitabhängigkeit von $\mathscr{X}$ kommt nur über eine evtl. vorhandene explizite Zeitfunktion zustande.

Bei Vorgabe des HERMITEschen Operators $\mathscr{X}$ liest sich die Gl. (15) als eine Operator-Differentialgleichung 1. Ordnung für $\mathscr{A}(t, t_0)$,

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathscr{A}(t, t_0) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathscr{X}(t)\, \mathscr{A}(t, t_0)}\,. \tag{17}$$

Auf die Lösung solcher Gleichungen gehen wir im § 7 ein.

In vielen Fällen benutzt man für $\mathscr{X}$ eine explizit zeit*un*abhängige Observable, so daß der Operator $\mathscr{X}$ in dem durch ihn definierten Bild nach Gl. (16) auch total-zeitlich konstant ist.[1]) Die Differentialgleichung (17) besitzt dann die Lösung

$$\mathscr{A}(t, t_0) = \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathscr{X} \cdot (t - t_0)}, \tag{18}$$

[1]) x und p selbst werden dabei i. allg. natürlich Zeitfunktionen sein, aber solche, daß für $\mathscr{X}(x, p)$ ein zeitlich konstanter Operator resultiert.

die also die Zeitabhängigkeit (8) der Operatoren bestimmt. Diese läßt sich mit Hilfe der Entwicklung (2.2–15) als *Potenzreihe* in $t - t_0$ direkt angeben. Zum Beispiel erhält man aus Gl. (7)

$$\boxed{\begin{aligned} x(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \frac{(t-t_0)^n}{n!} [\mathscr{X}, x(t_0)]_{(n)}, \\ p(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \frac{(t-t_0)^n}{n!} [\mathscr{X}, p(t_0)]_{(n)} \end{aligned}} \, . \tag{19}$$

Die ersten Glieder dieser Reihe lauten

$$x(t) = x(t_0) + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}(t - t_0)[\mathscr{X}, x(t_0)] + \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2 \frac{(t-t_0)^2}{2} \big[\mathscr{X}, [\mathscr{X}, x(t_0)]\big] + \cdots .$$

Für einen beliebigen Operator $\mathscr{L}(x, p, t)$ liefert Gl. (8)

$$\boxed{\mathscr{L}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \frac{(t-t_0)^n}{n!} [\mathscr{X}, \mathscr{L}(x(t_0), p(t_0), t)]_{(n)}} \, . \tag{19a}$$

Im § 6 werden wir durch spezielle Wahl des Operators $\mathscr{X}$ auf die üblichen Bilder, nämlich das SCHRÖDINGER-, HEISENBERG- und Wechselwirkungsbild geführt.

c) Die Differentialgleichungen der Bewegung

Führt man die Definition des HERMITEschen Operators $\mathscr{X}$ in die Gl. (14) ein, so erhält man für die *totale zeitliche Veränderung irgendeines Operators $\mathscr{L}(t)$ in dem betrachteten Bild die Differentialgleichung*

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\mathscr{L}(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{X}(t), \mathscr{L}(t)] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}(t) \\ &= \mathring{\mathscr{L}}(t) - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{H}(t) - \mathscr{X}(t), \mathscr{L}(t)] \end{aligned}} \, . \tag{20}$$

In der zweiten Zeile ist der Zusammenhang mit Gl. (1) zum Ausdruck gebracht worden. Alle auftretenden Operatoren sind natürlich in der Zeitabhängigkeit des zugrunde liegenden Bildes gemeint.

Setzt man $\mathscr{L} = \mathscr{H}$, so sieht man aus

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{H}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{X}, \mathscr{H}] + \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}}, \tag{21}$$

daß in einem allgemeinen Bild der HAMILTON-Operator auch dann nicht totalzeitlich konstant zu sein braucht, wenn er explizit zeitunabhängig ist $\left(\mathring{\mathscr{H}} = \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathscr{O}\right)$. Seine Bewegung wird durch den Kommutator $[\mathscr{X}, \mathscr{H}]$ bestimmt.

Identifiziert man $\mathscr{L}$ mit dem *statistischen Operator* $\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)$, so erhält man — bei Berücksichtigung von $\overset{\circ}{\mathscr{P}}_{|\Phi\rangle} = \mathcal{O}$ — für *seine totale zeitliche Veränderung* in dem zugrunde liegenden Bild

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H}(t) - \mathscr{X}(t), \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}(t)\right]} \,. \tag{22}$$

Es ist ein leichtes, hieraus die *Bewegungsgleichung für den Zustandsvektor* $|\Phi(t)\rangle$ selbst abzuleiten. Bei Anwendung auf einen beliebigen, festen Vektor $|\varphi\rangle$ erhalten wir aus Gl. (22)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\,|\Phi\rangle}{\mathrm{d}t}\langle\Phi\,|\,\varphi\rangle + |\Phi\rangle\frac{\mathrm{d}\,\langle\Phi|}{\mathrm{d}t}|\varphi\rangle &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,|\Phi\rangle\,\langle\Phi\,|\,\varphi\rangle \\ &\quad + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,|\Phi\rangle\,\langle\Phi\,|\,(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,\varphi\rangle.\end{aligned} \tag{23}$$

Wegen der HERMITEizität von $\mathscr{H} - \mathscr{X}$ ergibt sich

$$\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,|\Phi\rangle + \frac{\mathrm{d}\,|\Phi\rangle}{\mathrm{d}t}\right)\langle\Phi\,|\,\varphi\rangle + |\Phi\rangle\left\langle\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,\Phi + \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}\,\middle|\,\varphi\right\rangle = 0,$$

d. h., der Vektor $\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,|\Phi\rangle + \frac{\mathrm{d}\,|\Phi\rangle}{\mathrm{d}t}$ ist parallel zu $|\Phi\rangle$,

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,|\Phi\rangle + \frac{\mathrm{d}\,|\Phi\rangle}{\mathrm{d}t} = \alpha\,|\Phi\rangle\,. \tag{24}$$

Für den Zahlenfaktor α, der eine Zeitfunktion $\alpha(t)$ sein kann, finden wir durch Einsetzen in Gl. (23)

$$\alpha\,|\Phi\rangle\,\langle\Phi\,|\,\varphi\rangle + \alpha^*\,|\Phi\rangle\,\langle\Phi\,|\,\varphi\rangle = 0$$

oder

$$\alpha + \alpha^* = 0,$$

d. h., α muß rein imaginär sein. Diese Größe $\alpha = \mathrm{i}\beta(t)$ (β reell) kann man ohne Einschränkung der Allgemeinheit zu Null machen, weil $|\Phi\rangle$ nur bis auf einen Phasenfaktor bestimmt ist, der bei der Berechnung der Erwartungswerte nicht eingeht. Setzt man nämlich

$$|\Phi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int\beta(t)\mathrm{d}t}\,|\Phi'(t)\rangle,$$ [1]

so folgt aus Gl. (24)

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathscr{H} - \mathscr{X})\,|\Phi'\rangle + \frac{\mathrm{d}\,|\Phi'\rangle}{\mathrm{d}t} = 0\,.$$

Wir lassen den Strich wieder weg und erhalten damit für *die zeitliche Veränderung des Zustandsvektors* $|\Phi(t)\rangle$ *in dem betrachteten Bild*

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\,|\Phi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big(\mathscr{H}(t) - \mathscr{X}(t)\big)\,|\Phi(t)\rangle} \,. \tag{25}$$

---

[1]) Eine Veränderung des Energie-Nullpunktes bedeutet ebenfalls nur eine solche physikalisch unbeobachtbare Änderung der Phase von $|\Phi\rangle$.

Für die *zeitliche Veränderung der Eigenvektoren* $|u_\Lambda(t)\rangle$ eines explizit zeit*un*abhängigen Operators $\mathcal{L}$ ergibt sich hingegen aus Gl. (13) [wenn man Gl. (17) berücksichtigt]

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\,|u_\Lambda(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = +\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathcal{X}(t)\,|u_\Lambda(t)\rangle}\,. \tag{26}$$

d) Die Bewegung des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$ als unitäre Transformation

Die gesamte zeitliche Veränderung des Zustandsvektors (Fig. 57) in dem zugrunde liegenden Bild zwischen irgend zwei Zeiten t_0 und t beschreiben wir durch einen Operator $\mathcal{C}(t, t_0)$

$$\boxed{|\Phi(t)\rangle = \mathcal{C}(t, t_0)\,|\Phi(t_0)\rangle}\,,^{1)} \tag{27}$$

der nach Gl. (25) der Differentialgleichung

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\mathcal{C}(t, t_0)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big(\mathcal{H}(t) - \mathcal{X}(t)\big)\,\mathcal{C}(t, t_0)} \tag{28}$$

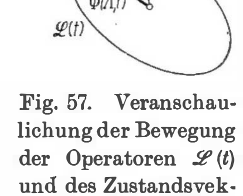


Fig. 57. Veranschaulichung der Bewegung der Operatoren $\mathcal{L}(t)$ und des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$

genügt. Für $\mathcal{H}(t)$ ist dabei die durch Gl. (21) festgelegte Zeitabhängigkeit in dem zugrunde liegenden Bild einzusetzen. Die Integration dieser Operator-Differentialgleichung werden wir in § 7 besprechen. Der Operator $\mathcal{C}(t, t_0)$ ist wegen der HERMITEizität von $\mathcal{H} - \mathcal{X}$ *unitär* (Aufg. 69) und erfüllt ebenfalls die Zusammensetzungsvorschriften (10) bis (12),

$$\mathcal{C}^\dagger(t, t_0) = \mathcal{C}^{-1}(t, t_0)\,, \tag{29}$$

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{C}(t, t) &= 1\,, \\ \mathcal{C}(t, t_0) &= \mathcal{C}(t, t_1)\,\mathcal{C}(t_1, t_0)\,, \\ \mathcal{C}(t, t_0) &= \mathcal{C}^\dagger(t_0, t)\,. \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

Aus der Unitarität von $\mathcal{C}$ folgt, daß *die Länge des Zustandsvektors zeitlich konstant* ist [*Erhaltung der Wahrscheinlichkeitsnormierung*],

$$\||\Phi(t)\rangle\| = \||\Phi(t_0)\rangle\| = 1\,. \tag{31}$$

Die Gl. (27) läßt sich natürlich auch mit dem statistischen Operator $\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}(t)$ formulieren. Der Operator $\mathcal{C}(t, t_0)$ bestimmt seine *gesamte* Zeitabhängigkeit (also einschließlich der expliziten),

$$\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}(t) = \mathcal{C}(t, t_0)\,\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}(t_0)\,\mathcal{C}^\dagger(t, t_0)\,. \tag{32}$$

Im Gegensatz zur Gl. (9) steht jetzt auf der rechten Seite in der Mitte der statistische Operator zur Zeit t_0.

---

1) Im Gegensatz zu $\mathcal{A}$, in dem die explizite Zeitabhängigkeit nicht enthalten ist!

e) Der unitäre Operator $\mathcal{U} = \mathcal{A}^\dagger \mathcal{C}$

Für die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsamplituden und der Erwartungswerte (§ 4) ist der unitäre Operator

$$\boxed{\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{A}^\dagger(t, t_0)\,\mathcal{C}(t, t_0)} \tag{33}$$

von Bedeutung (Fig. 57). Er erfüllt i. allg. nicht solch einfache Zusammensetzungsvorschriften, wie $\mathcal{A}$ und $\mathcal{C}$ es tun. Man kann jedoch aus jenen von $\mathcal{A}$ und $\mathcal{C}$ eine Reihe von Relationen für $\mathcal{U}$ herleiten. Die wichtigsten lauten (Aufg. 69)

$$\mathcal{U}(t, t) = 1\,, \tag{34}$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{A}^\dagger(t_1, t_0)\,\mathcal{U}(t, t_1)\,\mathcal{C}(t_1, t_0) = \mathcal{A}^\dagger(t_1, t_0)\,\mathcal{U}(t, t_1)\,\mathcal{A}(t_1, t_0)\,\mathcal{U}(t_1, t_0)\,, \tag{35}$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{A}^\dagger(t, t_0)\,\mathcal{U}^\dagger(t_0, t)\,\mathcal{A}(t, t_0)\,. \tag{36}$$

Auch die zeitliche Veränderung des Operators $\mathcal{U}$ folgt aus jener von $\mathcal{A}$ und $\mathcal{C}$. Durch Differentiation von Gl. (33) findet man nämlich

$$\dot{\mathcal{U}} = \dot{\mathcal{A}}^\dagger \mathcal{C} + \mathcal{A}^\dagger \dot{\mathcal{C}} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathcal{A}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{C}\,.$$

Berücksichtigen wir die Gl. (8), so ergibt sich die Differentialgleichung

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\mathcal{U}(t, t_0)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathcal{H}\big(x(t_0), p(t_0), t\big)\,\mathcal{U}(t, t_0)}\,. \tag{37}$$

Der Operator $\mathcal{U}(t, t_0)$ wird also (abgesehen von der expliziten Zeitabhängigkeit t) durch den HAMILTON-Operator $\mathcal{H}$ zur Zeit t_0 bestimmt. Dieser Unterschied gegenüber $\mathcal{A}$ und $\mathcal{C}$ ist auch die Ursache dafür, daß für $\mathcal{U}$ andere Zusammensetzungsregeln gelten als für $\mathcal{A}$ und $\mathcal{C}$.

Ist $\mathcal{H}$ insbesondere explizit zeit*un*abhängig, so hat die Differentialgleichung (37) die Lösung

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}(t_0)\cdot(t-t_0)}\,. \tag{38}$$

Ist außerdem der zugrunde gelegte Operator $\mathcal{X}$ ebenfalls explizit zeitunabhängig, so erhält man nach Gl. (18) für den Operator $\mathcal{C}$ die Darstellung

$$\mathcal{C}(t, t_0) = \mathcal{A}(t, t_0)\,\mathcal{U}(t, t_0) = \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{X}\cdot(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}(t_0)\cdot(t-t_0)}\,. \tag{39}$$

Solange $\mathcal{X}$ mit $\mathcal{H}$ nicht vertauschbar ist, darf man dafür jedoch *nicht eine* Exponentialfunktion schreiben (vgl. 2.2 § 1)!

f) Hinweis auf das Rechnen in einem bestimmten Bild

Wir wollen an dieser Stelle noch ganz besonders darauf hinweisen, daß man die quantentheoretische Dynamik *vollständig* in *einem* Bild, das durch die Vorgabe des HERMITEschen Operators $\mathcal{X}$ definiert wird, durchführen kann. Die in die-

sem Bild gewonnenen Ergebnisse erlauben unmittelbar die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten

$$w_\Lambda(t) = |\langle u_\Lambda(t)|\Phi(t)\rangle|^2 \tag{40}$$

und Erwartungswerte

$$\langle \mathscr{L}\rangle(t) = \langle \Phi(t)|\mathscr{L}(t)\,\Phi(t)\rangle \tag{41}$$

für den Ausgang einer Messung zur Zeit t.

Es ist also keineswegs nötig — wie manchmal der Anschein erweckt wird —, daß man etwa von dem Bild ausgeht, in dem alle (explizit zeitunabhängigen) Observablen durch zeitunabhängige Operatoren dargestellt werden [SCHRÖDINGER-Bild (§ 6 b)], dann in ein anderes Bild transformiert (§ 5), dort die Rechnung ausführt, schließlich wieder ins SCHRÖDINGER-Bild zurückrechnet und mit diesem Ergebnis die Erwartungswerte bestimmt.

Aufg. 69: Man beweise die Eigenschaften (29) und (30) des Operators $\mathscr{C}$ und leite daraus die Relationen (35) und (36) für $\mathscr{U}$ ab.

Aufg. 70: Die Relation (35) ist mit dem speziellen Operator (38) zu verifizieren.

§ 4. Die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsamplituden und Erwartungswerte

a) Die Schrödinger-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplituden

Die Wahrscheinlichkeit, daß sich bei der Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ zur Zeit t ein Meßwert Λ ergibt, ist gegeben durch das Absolutquadrat der Wahrscheinlichkeitsamplitude ($\mathscr{L}$-Darstellung)

$$\Phi(\Lambda, t) = \langle u_\Lambda(t)\,|\,\Phi(t)\rangle. \tag{42}$$

Diese komplexen Größen sind als Skalarprodukte invariant gegenüber unitären Transformationen und daher *bildunabhängig*. Setzen wir voraus, daß die zu messende Größe $\mathscr{L}$ explizit zeitunabhängig ist, so erhalten wir aus den Gl. (25) und (26) für die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\Lambda, t)$ bei festem Λ

$$\frac{\partial\Phi(\Lambda,t)}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}\,\langle u_\Lambda(t)\,|\,\Phi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\,\langle u_\Lambda(t)|}{\mathrm{d}t}\,|\Phi(t)\rangle + \langle u_\Lambda(t)|\,\frac{\mathrm{d}\Phi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}$$
$$= \left\langle \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{X} u_\Lambda\,|\Phi\right\rangle + \left\langle u_\Lambda\,\middle|\,\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,(\mathscr{X} - \mathscr{H})\,\Phi\right\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\langle u_\Lambda\,|\,\mathscr{H}\,\Phi\rangle.$$

Die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\Lambda, t)$ wird somit durch die (bildunabhängige!) SCHRÖDINGER-*Gleichung*

$$\boxed{\frac{\partial\Phi(\Lambda,t)}{\partial t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{H}\,\Phi(\Lambda,t)} \tag{43}$$

bestimmt. Diese Gleichung ist eine unmittelbare Folge unserer Postulate der Quantentheorie. Sie hat i. allg. nichts mit der SCHRÖDINGER-Gleichung für das klassische Elektronenfeld zu tun.

Mit der Entwicklung

$$\mathscr{H}\,\Phi(\Lambda, t) = \langle u_\Lambda \,|\, \mathscr{H}\,\Phi\rangle = \mathop{\mathclap{\int}\sum}_{\Lambda'} \langle u_\Lambda \,|\, \mathscr{H}\, u_{\Lambda'}\rangle \langle u_{\Lambda'} \,|\, \Phi\rangle \,\mathrm{d}\Lambda'$$

lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung in den Matrixelementen $H(\Lambda, \Lambda') = \langle u_\Lambda \,|\, \mathscr{H}\, u_{\Lambda'}\rangle$

$$\boxed{\mathop{\mathclap{\int}\sum}_{\Lambda'} \left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, H(\Lambda, \Lambda') + \delta(\Lambda, \Lambda')\,\frac{\partial}{\partial t}\right\} \Phi(\Lambda', t)\,\mathrm{d}\Lambda' = 0}\,. \tag{44}$$

Wenn die Matrixelemente $H(\Lambda, \Lambda')$ Ableitungen der δ-Funktion sind [Gl. (2.2–28)], wird dieses *lineare Gleichungssystem* zu einer *partiellen Differentialgleichung in* Λ *und* t.

In dem Fall, daß die zu messende Größe $\mathscr{L}$ explizit zeitabhängig ist, gilt für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\Lambda, t)$ nicht mehr die einfache Gl. (43) oder (44). In diesem Fall ist nämlich auch die Veränderung der Eigenvektoren $|u_\Lambda\rangle$ zu berücksichtigen, die durch die explizite Zeitabhängigkeit zustande kommt. Da dieser Fall aber nur selten interessiert, wollen wir auf eine nähere Diskussion nicht eingehen.

b) Die Integration der Schrödinger-Gleichung durch die unitäre Transformation $\mathscr{U}(t, t_0)$

Durch die Gl. (13) und (27) wird der Zusammenhang der Eigenvektoren und des Zustandsvektors zwischen irgend zwei Zeiten t_0 und t vermittelt. Wir erhalten daher für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\Lambda, t)$ (bezüglich einer explizit zeitunabhängigen Observablen $\mathscr{L}$)

$$\begin{aligned}\Phi(\Lambda, t) &= \langle u_\Lambda(t) \,|\, \Phi(t)\rangle = \langle u_\Lambda(t_0) \,|\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0)\,\mathscr{C}(t, t_0)\,\Phi(t_0)\rangle \\ &= \mathop{\mathclap{\int}\sum}_{\Lambda'} \langle u_\Lambda(t_0) \,|\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_0)\,\mathscr{C}(t, t_0)\, u_{\Lambda'}(t_0)\rangle \langle u_{\Lambda'}(t_0) \,|\, \Phi(t_0)\rangle\,\mathrm{d}\Lambda'.\end{aligned} \tag{45}$$

In der letzten Gleichung wurden die Eigenvektoren $|u_{\Lambda'}(t_0)\rangle$ eingeschoben, von denen wir annehmen wollen, daß sie vollständig sind. Wegen $\mathscr{A}^\dagger \mathscr{C} = \mathscr{U}$ ergibt sich damit für die Wahrscheinlichkeitsamplitude zwischen irgend zwei Zeiten t_0 und t der lineare Zusammenhang

$$\boxed{\Phi(\Lambda, t) = \mathop{\mathclap{\int}\sum}_{\Lambda'} U(\Lambda, \Lambda';\, t, t_0)\,\Phi(\Lambda', t_0)\,\mathrm{d}\Lambda'}\,. \tag{46}$$

Die die Dynamik beschreibende Funktion U ist also die Matrix des unitären Operators $\mathscr{U}(t, t_0)$, gebildet mit den Eigenvektoren $|u_\Lambda(t_0)\rangle$ zur Zeit t_0,

$$\boxed{U(\Lambda, \Lambda';\, t, t_0) = \langle u_\Lambda(t_0) \,|\, \mathscr{U}(t, t_0)\, u_{\Lambda'}(t_0)\rangle}\,. \tag{47}$$

Mit dem Operator $\mathscr{C}$ besteht der Zusammenhang

$$U(\Lambda, \Lambda';\, t, t_0) = \langle u_\Lambda(t) \,|\, \mathscr{C}(t, t_0)\, u_{\Lambda'}(t_0)\rangle. \tag{48}$$

Im Fall eines explizit zeitunabhängigen HAMILTON-Operators ist $\mathcal{U}$ durch die Gl. (38) gegeben. Schiebt man daher auf der rechten Seite von Gl. (47) *Energieeigenzustände* $|u_a(t_0)\rangle$,

$$\mathcal{H}(t_0)\,|u_a(t_0)\rangle = E_a\,|u_a(t_0)\rangle,$$

ein, so erhält man

$$\boxed{U(\Lambda, \Lambda'; t, t_0) = \sum_a\!\!\!\!\!\!\int u_a(\Lambda)\, u_a^*(\Lambda')\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_a(t-t_0)}\, da}\,. \tag{49}$$

Diese Beziehung erlaubt also die Berechnung der integrierenden Matrix U, wenn die (zeitunabhängigen) Energieeigenfunktionen $u_a(\Lambda) = \langle u_\Lambda(t_0)\,|\,u_a(t_0)\rangle$ in der $\mathcal{L}$-Darstellung vorliegen!

Identifizieren wir $\mathcal{L}$ insbesondere mit dem *Ortsoperator eines Teilchens*, so ist Gl. (49) eine Formel, die wir in 1.5 § 3 für die zeitliche Ausbreitung einer *kräftefreien* Materiewelle fanden. Die dort angegebene Funktion $U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t, 0)$ können wir unmittelbar übernehmen. Es gilt also im Eindimensionalen

$$\langle u_x\,|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t-t_0)}\,|\,u_{x'}\rangle = e^{-\frac{\pi}{4}i}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t_0)}}\; e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t-t_0}}, \tag{50}$$

woraus für den dreidimensionalen Fall (vgl. 4.1 § 6) folgt

$$\langle u_{\mathfrak{r}}|\; e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}(t-t_0)}\,|u_{\mathfrak{r}'}\rangle = e^{-\frac{3\pi}{4}i}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t_0)}}^{\,3}\; e^{\frac{im}{2\hbar}\frac{(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}')^2}{t-t_0}}. \tag{50a}$$

Die physikalische Interpretation ist aber jetzt gegenüber der damaligen eine völlig andere: Es handelt sich nicht mehr um das Zerfließen eines Materiewellenpaketes $\psi(\mathfrak{r}, t)$, sondern um die *zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsamplitude* $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ *für eine Ortsmessung.*

Wird ein Teilchen mit einem zur Zeit t_0 bekannten Anfangszustand $\Phi(\mathfrak{r}, t_0)$ auf ein Target geschossen, so gelangt es unter den Einfluß von dessen Potential. Mittels der Energieeigenfunktion $u_a(\mathfrak{r})$ in der Ortsdarstellung erhält man aus Gl. (49) die zugehörige integrierende Funktion $U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t, t_0)$, die über Gl. (46) die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Phi(\mathfrak{r}, t)|^2$ dafür ergibt, daß das Teilchen zu einer späteren Zeit t an einer Stelle $\mathfrak{r}$ angetroffen wird. Hieraus läßt sich der Wirkungsquerschnitt für den Streuprozeß berechnen (Kap. 4.7).

Ist die Größe $\mathcal{L}$ andererseits der (explizit zeitunabhängige) HAMILTON-Operator $\mathcal{H}$, so wird $u_a(E) = \delta(E, E_a)$, und man findet aus Gl. (49)

$$U(E, E'; t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}\,\delta(E, E'). \tag{51}$$

Die Lösung (46) wird

$$\Phi(E, t) = \Phi(E, t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}, \tag{52}$$

d. h., *die Wahrscheinlichkeit für die Gesamtenergie des Systems ist zeitlich konstant.*

Wurde insbesondere zur Zeit t_0 ein *diskreter Energiewert* E' gemessen, d. h. $|\Phi(t_0)\rangle = |u_{E'}(t_0)\rangle$, so lautet zur Zeit t der Zustandsvektor

$$|\Phi(t)\rangle = |u_{E'}(t)\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E'(t-t_0)}. \tag{52'}$$

Bildet man damit den Erwartungswert irgendeiner (explizit zeitunabhängigen) Observablen $\mathscr{L}$, so findet man nach Gl. (8) und (13)

$$\langle\mathscr{L}\rangle(t) = \langle\mathscr{L}\rangle(t_0), \tag{53}$$

d. h., *die Erwartungswerte sind dann zeitlich konstant. Man nennt daher den Zustand* (52') *stationär.*[1])

c) Das Ehrenfestsche Theorem

Für die zeitliche Veränderung des Erwartungswertes

$$\langle\mathscr{L}\rangle(t) = \langle\Phi(t)\,|\,\mathscr{L}(t)\,\Phi(t)\rangle$$

einer beliebigen Observablen $\mathscr{L}$ resultiert aus Gl. (20) und (25)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\mathscr{L}\rangle &= \frac{d\langle\Phi|}{dt}\,\mathscr{L}\,\Phi\rangle + \langle\Phi|\,\frac{d\mathscr{L}}{dt}\,\Phi\rangle + \langle\Phi|\,\mathscr{L}\,\frac{d|\Phi\rangle}{dt}\\ &= \langle\frac{i}{\hbar}(\mathscr{X}-\mathscr{H})\,\Phi\,|\,\mathscr{L}\,\Phi\rangle + \langle\Phi|\,\mathring{\mathscr{L}} + \frac{i}{\hbar}[\mathscr{X}-\mathscr{H},\,\mathscr{L}]\,|\Phi\rangle\\ &\quad + \langle\Phi|\,\mathscr{L}\,\frac{i}{\hbar}(\mathscr{X}-\mathscr{H})\,\Phi\rangle = \langle\,\Phi\,|\,\mathring{\mathscr{L}}\,\Phi\rangle.\end{aligned}$$

Die Beziehung

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\mathscr{L}\rangle = \langle\mathring{\mathscr{L}}\rangle}, \tag{54}$$

nach der die *zeitliche Veränderung des Erwartungswertes einer Observablen* $\mathscr{L}$ *gleich ist dem Erwartungswert der Observablen* $\mathring{\mathscr{L}}$, heißt EHRENFESTsches Theorem.

Im stationären Zustand verschwindet daher nach Gl. (53) der Erwartungswert jedes Operators $\mathring{\mathscr{L}}$, sofern $\mathscr{L}$ nicht explizit zeitabhängig ist (vgl. dazu auch Aufg. 59).

Wenn $\mathring{\mathscr{L}}$ mit anderen Operatoren nach klassischen Gesetzen verknüpft ist, folgt aus Gl. (54), daß auch die Erwartungswerte die klassischen Gesetze erfüllen. Zum Beispiel ergibt sich aus

$$m\,\mathring{\mathring{x}} = \mathscr{K}$$

[1]) Dabei ist wesentlich, daß E' *diskret* ist. Bei kontinuierlichem E' ist der Zustandsvektor [Gl. (3.3–32)] kein exakter Eigenvektor von $\mathscr{H}$ und damit nicht stationär.

die Gleichung

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \langle \mathcal{K} \rangle . \tag{55}$$

Man darf jedoch hieraus nicht folgern, daß die Integrale dieser Gleichung $\langle x \rangle (t)$ dieselbe Form haben wie in der klassischen Mechanik, weil i. allg. $\langle \mathcal{K}(x) \rangle \neq K(\langle x \rangle)$ ist.

Für eine Observable $\mathcal{L}$, die eine „*Erhaltungsgröße*" ist, d. h. quantentheoretisch, daß sie der Operatorgleichung

$$\mathring{\mathcal{L}} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \mathcal{L}] + \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \right)_{ex} = \mathcal{O} \tag{56}$$

genügt[1]), ergibt das EHRENFESTsche Theorem, daß ihr Erwartungswert $\langle \mathcal{L} \rangle$, gebildet mit einem beliebigen Zustand $|\Phi\rangle$, zeitlich konstant ist,

$$\langle \mathcal{L} \rangle = \text{const} . \tag{57}$$

Man beachte den Unterschied gegenüber Gl. (53): Dort war der Zustand stationär und $\mathcal{L}$ beliebig. In Gl. (57) hingegen ist der Zustand $|\Phi\rangle$ beliebig, dafür erfüllt aber $\mathcal{L}$ die Gl. (56).

d) Die Energie-Zeit-Unschärferelation

Zwischen der Energie E und irgendeiner (explizit zeitunabhängigen) Observablen L besteht nach Gl. (3.3–58) die Unschärferelation

$$\Delta E \cdot \Delta L \geqq \frac{\hbar}{2} |\langle \mathring{\mathcal{L}} \rangle| . \tag{58}$$

Nach dem eben abgeleiteten EHRENFESTschen Theorem können wir auf der rechten Seite die zeitliche Veränderung des Erwartungswertes $\langle \mathcal{L} \rangle$ einsetzen

$$\Delta E \cdot \Delta L \geqq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle \mathcal{L} \rangle \right| . \tag{59}$$

Diese Gleichung erlaubt eine wichtige Folgerung. Definieren wir eine Zeit

$$\tau_L = \frac{\Delta L}{\left| \frac{d}{dt} \langle \mathcal{L} \rangle \right|} , \tag{60}$$

so gibt diese die Dauer an, innerhalb der der Erwartungswert sich um die Unschärfe ΔL verändert (Fig. 58), d. h., *τ_L ist die Zeit, innerhalb der das System Werte im Unschärfeintervall $L \cdots L + \Delta L$ annehmen kann.* Für diese Zeit folgt

---

[1]) Die totale zeitliche Veränderung einer Erhaltungsgröße ist in einem beliebigen Bild nicht Null, sondern nach Gl. (20) durch

$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = - \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H} - \mathcal{X}, \mathcal{L}]$$

gegeben. Erst das Zusammenwirken mit der Dynamik des Zustandsvektors liefert das Ergebnis (57).

aus Gl. (59) die *Energie-Zeit-Unschärferelation*

$$\boxed{\Delta E \cdot \tau_L \geqq \frac{\hbar}{2}}. \tag{61}$$

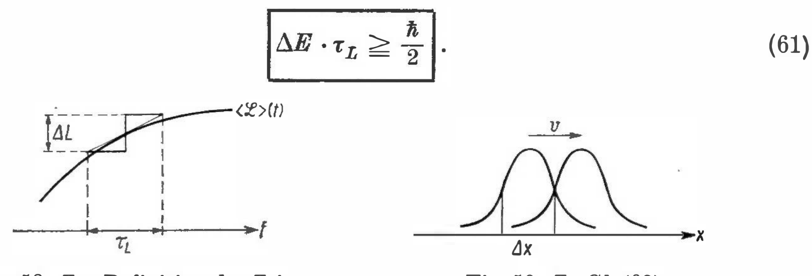


Fig. 58. Zur Definition der Zeit τ_L

Fig. 59. Zu Gl. (62)

Betrachtet man etwa eine Ortsmessung $\mathscr{L} = x$, so ist

$$\tau_x = \frac{\Delta x}{\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle\right|} = \frac{\Delta x}{|v|} \tag{62}$$

das Zeitintervall, innerhalb der ein Wahrscheinlichkeitswellenpaket, das die Gruppengeschwindigkeit v und die Breite Δx hat, sich um die Ortsunschärfe Δx fortbewegt hat (Fig. 59). Die Zeit, in der sich das Teilchen an einem Ort x befindet, ist also wegen der Ortsunschärfe Δx nur bis auf das Intervall $t \cdots t + \tau_x$ angebbar. Nach der Unschärferelation (61) ist dieses Zeitintervall mit der Energieunschärfe ΔE des Wellenpaketes korreliert.

Setzt man $\mathscr{L} = \mathscr{H}$, so wird wegen $\overset{\circ}{\mathscr{H}} = \mathcal{O}$ $\left(\text{bei } \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} = \mathcal{O}\right)$ die Beziehung (58) zum trivialen Ergebnis $(\Delta E)^2 \geqq 0$.

Liegt ein *stationärer* Zustand vor, so ist nach Gl. (53) der Erwartungswert einer explizit zeitunabhängigen Observablen zeitlich konstant, so daß in Gl. (59) die rechte Seite verschwindet. Außerdem ist in diesem Fall aber auch $\Delta E = 0$.

Aufg. 71: Man berechne die Erwartungswerte $\langle x\rangle(t)$ und $\langle p\rangle(t)$ für ein Teilchen in einem homogenen, elektrischen Feld und für den harmonischen Oszillator.

Aufg. 72: Welcher Zusammenhang besteht bei stationären Zuständen zwischen den Erwartungswerten der kinetischen und potentiellen Energie, wenn die potentielle Energie eine homogene Funktion vom Grade α ist?

§ 5. Der Zusammenhang zwischen zwei Bildern

Es werde angenommen, daß zu irgendeinem Zeitpunkt t_* (der keineswegs t_0 sein muß) zwei Bilder, die wir zur Unterscheidung mit B und B' bezeichnen, übereinstimmen, d. h.

$$\begin{aligned} \mathscr{L}^B(t_*) &= \mathscr{L}^{B'}(t_*), \\ |u_A^B(t_*)\rangle &= |u_A^{B'}(t_*)\rangle, \end{aligned} \qquad |\Phi^B(t_*)\rangle = |\Phi^{B'}(t_*)\rangle. \tag{63}$$

Welcher Zusammenhang besteht dann zu einem anderen Zeitpunkt t zwischen diesen Bildern?

Aus der zeitlichen Dynamik der HERMITEschen Operatoren [Gl. (8)] in B und B',

$$\mathscr{L}^B(t) = \mathscr{A}^B(t, t_*)\, \mathscr{L}\big(x(t_*), p(t_*), t\big)\, \mathscr{A}^{B\dagger}(t, t_*),$$
$$\mathscr{L}^{B'}(t) = \mathscr{A}^{B'}(t, t_*)\, \mathscr{L}\big(x(t_*), p(t_*), t\big)\, \mathscr{A}^{B'\dagger}(t, t_*),$$

folgt durch Elimination von $\mathscr{L}(x(t_*), p(t_*), t)$, das in beiden Bildern nach Gl. (63) gleich ist, die Relation

$$\mathscr{L}^B(t) = \mathscr{A}^B(t, t_*)\, \mathscr{A}^{B'\dagger}(t, t_*)\, \mathscr{L}^{B'}(t)\, \mathscr{A}^{B'}(t, t_*)\, \mathscr{A}^{B\dagger}(t, t_*). \tag{64}$$

Entsprechend ergibt sich aus

$$|\Phi^B(t)\rangle = \mathscr{C}^B(t, t_*)\, |\Phi(t_*)\rangle,$$
$$|\Phi^{B'}(t)\rangle = \mathscr{C}^{B'}(t, t_*)\, |\Phi(t_*)\rangle$$

der Zusammenhang

$$|\Phi^B(t)\rangle = \mathscr{C}^B(t, t_*)\, \mathscr{C}^{B'\dagger}(t, t_*)\, |\Phi^{B'}(t)\rangle \tag{65}$$

zwischen den Zustandsvektoren in den beiden Bildern.

Damit die Wahrscheinlichkeitsamplituden zur Zeit t in beiden Bildern übereinstimmen, muß nach Gl. (45) gelten

$$\langle u_A(t_*)\,|\, \mathscr{U}^B(t, t_*)\, \Phi(t_*)\rangle = \langle u_A(t_*)\,|\, \mathscr{U}^{B'}(t, t_*)\, \Phi(t_*)\rangle.$$

Aus der Differentialgleichung (37) ersieht man, daß $\mathscr{U}(t, t_*)$ in B und B' tatsächlich gleich ist, weil $\mathscr{H}(x^B(t_*), p^B(t_*), t) = \mathscr{H}(x^{B'}(t_*), p^{B'}(t_*), t)$ gemäß Gl. (63) ist. Es gilt also

$$\boxed{\mathscr{U}^B(t, t_*) = \mathscr{U}^{B'}(t, t_*)}\,, \tag{66}$$

was zur Gleichheit von

$$\mathscr{C}^B(t, t_*)\, \mathscr{C}^{B'\dagger}(t, t_*) = \mathscr{A}^B(t, t_*)\, \mathscr{A}^{B'\dagger}(t, t_*) \tag{67}$$

führt.

Man kann also das Transformationsverhalten der HERMITEschen Operatoren und des Zustandsvektors durch einen gemeinsamen unitären Operator $\mathscr{Q}^{BB'}(t, t_*)$ beschreiben,

$$\boxed{\begin{aligned} &\mathscr{L}^B(t) = \mathscr{Q}^{BB'}(t, t_*)\, \mathscr{L}^{B'}(t)\, \mathscr{Q}^{BB'\dagger}(t, t_*) \\ &|\Phi^B(t)\rangle = \mathscr{Q}^{BB'}(t, t_*)\, |\Phi^{B'}(t)\rangle \end{aligned}} \tag{68}$$

der durch

$$\boxed{\mathscr{Q}^{BB'}(t, t_*) = \mathscr{A}^B(t, t_*)\, \mathscr{A}^{B'\dagger}(t, t_*) = \mathscr{Q}^{B'B\dagger}(t, t_*)} \tag{69}$$

gegeben ist.

§ 6. Die quantentheoretische Dynamik im Schrödinger-, Heisenberg- und Wechselwirkungsbild

a) Definition und Bewegungsgleichungen der drei Bilder

Für die quantentheoretische Behandlung der Dynamik sind drei verschiedene Bilder, das Schrödinger-Bild (S), das Heisenberg-Bild (H) und das Wechselwirkungsbild (W) üblich.

Das Schrödinger-Bild wird durch

$$\mathcal{X}^S = \mathcal{O} \tag{70S}$$

definiert. Im Heisenberg-Bild hingegen wird der Hamilton-Operator des Systems

$$\mathcal{X}^H = \mathcal{H}^H \tag{70 H}$$

verwendet. Das Wechselwirkungsbild geht von einer Aufspaltung des Hamilton-Operators

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{71}$$

aus, wobei $\mathcal{H}_0$ den Hamilton-Operator eines „ungestörten" Problems darstellt und $\mathcal{H}_1$ die Wechselwirkungsenergie. Diese „Störung" braucht jedoch zunächst keineswegs „klein" zu sein. Das Wechselwirkungsbild wird so eingerichtet, daß sich in ihm die Operatoren nach dem ungestörten Hamilton-Operator bewegen, d. h.

$$\mathcal{X}^W = \mathcal{H}_0^W . \tag{70 W}$$

Die Bewegungsgleichungen und unitären Transformationen in den drei Bildern erhält man sofort, wenn man diese Definitionen in die Gleichungen des § 3 einsetzt. Die nebenstehende Tabelle gibt eine Zusammenfassung und Gegenüberstellung der die einzelnen Bilder beherrschenden Relationen. Gl. (72) beschreibt die aus der Definition von $\mathcal{X}(t)$ folgenden unitären Transformationen $\mathcal{A}(t, t_0)$. Die totale zeitliche Veränderung der Operatoren $\frac{\mathrm{d}\mathcal{L}(t)}{\mathrm{d}t}$ wird durch Gl. (73) gegeben. Die darunter stehenden Gleichungen (74) bestimmen den Zusammenhang mit den Operatoren $\overset{\circ}{\mathcal{L}}(t)$ in den einzelnen Bildern. Die Dynamik des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$ wird durch die Gleichungen (75) erfaßt. Aus diesen folgen die Beziehungen (76) der unitären Transformationen $\mathcal{C}(t, t_0)$. Die Gleichungen (77) schließlich geben die unitären Transformationen $\mathcal{U}(t, t_0)$ an.

Der Zusammenhang zwischen den Bildern zu einer Zeit t ist durch die in den Gl. (78) gegebenen unitären Transformationen $\mathcal{Q}(t, t_*)$ gegeben, wenn die Bilder zur Zeit t_* übereinstimmen (§ 5).

SCHRÖDINGER-Bild	HEISENBERG-Bild	Wechselwirkungsbild $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1$	
$\mathscr{X}^S = \mathcal{O}$	$\mathscr{X}^H = \mathscr{H}^H$	$\mathscr{X}^W = \mathscr{H}_0^W$	(70)
$\frac{d\mathscr{A}^S}{dt} = \mathcal{O} \rightarrow \mathscr{A}^S = 1$	$\frac{d\mathscr{A}^H}{dt} = + \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}^H \mathscr{A}^H$	$\frac{d\mathscr{A}^W}{dt} = + \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}_0^W \mathscr{A}^W$	(72)
$\boxed{\frac{d\mathscr{L}^S}{dt} = \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}^S}$	$\boxed{\frac{d\mathscr{L}^H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathscr{H}^H, \mathscr{L}^H] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}^H}$	$\boxed{\frac{d\mathscr{L}^W}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathscr{H}_0^W, \mathscr{L}^W] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}^W}$	(73)
$\mathring{\mathscr{L}}^S = \frac{i}{\hbar} [\mathscr{H}^S, \mathscr{L}^S] + \frac{d\mathscr{L}^S}{dt}$	$\mathring{\mathscr{L}}^H = \frac{d\mathscr{L}^H}{dt}$	$\mathring{\mathscr{L}}^W = \frac{i}{\hbar} [\mathscr{H}_1^W, \mathscr{L}^W] + \frac{d\mathscr{L}^W}{dt}$	(74)
$\boxed{\frac{d\,\|\Phi^S\rangle}{dt} = - \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}^S \|\Phi^S\rangle}$	$\boxed{\frac{d\,\|\Phi^H\rangle}{dt} = 0 \rightarrow \|\Phi^H(t)\rangle = \|\Phi^H(t_0)\rangle}$	$\boxed{\frac{d\,\|\Phi^W\rangle}{dt} = - \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}_1^W \|\Phi^W\rangle}$	(75)
$\frac{d\mathscr{C}^S}{dt} = - \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}^S \mathscr{C}^S$	$\frac{d\mathscr{C}^H}{dt} = 0 \rightarrow \mathscr{C}^H = 1$	$\frac{d\mathscr{C}^W}{dt} = - \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}_1^W \mathscr{C}^W$	(76)
$\mathscr{U}^S = \mathscr{C}^S$	$\mathscr{U}^H = \mathscr{A}^{H\dagger}$	$\mathscr{U}^W = \mathscr{A}^{\dagger W} \mathscr{C}^W$, $\frac{d\mathscr{U}^W}{dt} = - \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}\left(x^W(t_0), p^W(t_0), t\right) \mathscr{U}^W$	(77)

Zusammenhänge:

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{Q}^{SH}(t, t_*) &= \mathscr{Q}^{HS\dagger}(t, t_*) = \mathscr{U}(t, t_*) \\ \mathscr{Q}^{WS}(t, t_*) &= \mathscr{Q}^{SW\dagger}(t, t_*) = \mathscr{A}^W(t, t_*) \\ \mathscr{Q}^{WH}(t, t_*) &= \mathscr{Q}^{HW\dagger}(t, t_*) = \mathscr{C}^W(t, t^*) = \mathscr{A}^W(t, t_*)\, \mathscr{U}(t, t_*) \end{aligned}\right\} \quad (78)$$

$$\mathscr{U}(t, t_*) \equiv \mathscr{U}^S(t, t_*) = \mathscr{U}^H(t, t_*) = \mathscr{U}^W(t, t_*)$$

b) Die Dynamik im Schrödinger-Bild

Aus der Bewegungsgleichung (73 S) der Operatoren ersieht man, daß im SCHRÖDINGER-Bild *alle explizit zeitunabhängigen Operatoren ruhen* ($\mathscr{A}^S = \mathbb{1}$). Für die Orts- und Impulsoperatoren gilt also z. B.

$$\frac{\mathrm{d}x^S}{\mathrm{d}t} = \mathcal{O} \quad \rightarrow \quad x^S(t) = x^S(t_0), \qquad \frac{\mathrm{d}p^S}{\mathrm{d}t} = \mathcal{O} \quad \rightarrow \quad p^S(t) = p^S(t_0) \tag{79}$$

und ebenso für irgendeinen Operator $\mathscr{L}(x, p)$

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}^S}{\mathrm{d}t} = \mathcal{O} \quad \rightarrow \quad \mathscr{L}^S(t) = \mathscr{L}^S(t_0). \tag{80}$$

Damit sind auch die Eigenvektoren $|u_\Lambda^S\rangle$ aller dieser Operatoren zeitlich konstant

$$\frac{\mathrm{d}\,|u_\Lambda^S\rangle}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \rightarrow \quad |u_\Lambda^S(t)\rangle = |u_\Lambda^S(t_0)\rangle. \tag{81}$$

Eine Zeitabhängigkeit eines Operators kommt im SCHRÖDINGER-Bild also nur durch eine evtl. vorhandene explizite Zeitfunktion $\mathscr{L}(x, p, t)$ zustande,

$$\mathscr{L}^S(t) = \mathscr{L}\left(x^S(t), p^S(t), t\right) = \mathscr{L}\left(x^S(t_0), p^S(t_0), t\right). \tag{82}$$

Die Bewegungsgleichung (75 S) für den *Zustandsvektor* $|\Phi^S(t)\rangle$ besagt, daß der Vektor $-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,|\mathscr{H}^S(t)\,\Phi^S(t)\rangle\,dt$ die zeitliche Veränderung $\mathrm{d}\,|\Phi^S\rangle$ bestimmt (Fig. 60). Für den HAMILTON-Operator $\mathscr{H}^S(t)$ ist dabei die durch Gl. (82) gegebene Zeitfunktion einzusetzen. Ist $\mathscr{H}$ insbesondere explizit zeitunabhängig, so ist $\mathscr{H}^S$ ein zeitlich konstanter Operator [Gl. (80)].

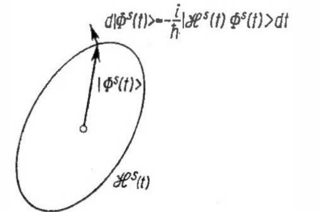


Fig. 60. Die zeitliche Veränderung des Zustandsvektors im SCHRÖDINGER-Bild

Die Zustandsvektoren $|\Phi^S\rangle$ zu irgend zwei Zeiten t_0 und t sind durch den unitären Operator $\mathscr{C}^S(t, t_0)$

$$|\Phi^S(t)\rangle = \mathscr{C}^S(t, t_0)\,|\Phi^S(t_0)\rangle \tag{83}$$

verknüpft. Ist $\mathscr{H}^S$ explizit zeit*un*abhängig, so folgt aus Gl. (76 S)

$$\boxed{\mathscr{C}^S(t, t_0) = \mathscr{U}^S(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}^S\cdot(t-t_0)}}. \tag{84}$$

Die hieraus sich ergebenden Folgerungen für die Dynamik der Wahrscheinlichkeitsamplituden und Erwartungswerte sind bereits (bildunabhängig) im § 4 ausführlich diskutiert worden und brauchen daher hier nicht noch einmal wiederholt werden.

c) Die Dynamik im Heisenberg-Bild

Weil im HEISENBERG-Bild die zeitliche Veränderung $\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}^H(t)}{\mathrm{d}t}$ eines Operators $\mathscr{L}$ durch den Operator $\mathring{\mathscr{L}}$ bestimmt wird [Gl. (73*H*) und (74*H*)], kommt in diesem Bild die Korrespondenz mit den klassischen Bewegungsgleichungen besonders deutlich zum Ausdruck; z. B. ist die Bewegung des Ortsoperators x durch den Operator der Geschwindigkeit $\mathring{x}$ gegeben,

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x^H(t)}{\mathrm{d}t} &= \mathring{x}^H(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}^H(t), x^H(t)] = \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p}\right)^H(t),\\ \frac{\mathrm{d}p^H(t)}{\mathrm{d}t} &= \mathring{p}^H(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}^H(t), p^H(t)] = -\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial x}\right)^H(t).\end{aligned} \tag{85}$$

Die Lösungen $x^H(t)$, $p^H(t)$ dieser HAMILTONschen *Gleichungen in Operatorform* müssen unter Wahrung der Vertauschungsrelationen aufgesucht werden. Ihre formale Integration geschieht mittels des durch Gl. (72*H*) bestimmten unitären Operators $\mathscr{A}^H(t, t_0) = \mathscr{U}^{H\dagger}(t, t_0)$,

$$\begin{aligned}x^H(t) &= \mathscr{A}^H(t, t_0)\, x^H(t_0)\, \mathscr{A}^{H\dagger}(t, t_0),\\ p^H(t) &= \mathscr{A}^H(t, t_0)\, p^H(t_0)\, \mathscr{A}^{H\dagger}(t, t_0).\end{aligned} \tag{86}$$

Im Fall eines explizit zeitunabhängigen HAMILTON-Operators sind diese Lösungen durch die Potenzreihen (19) $[\mathscr{K} = \mathscr{H}^H]$ gegeben.

Falls die Vertauschungsrelation $[p, x] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,1$ zu einer Zeit erfüllt ist, so bleibt sie im Laufe der Zeit bestehen. Dies ist eine unmittelbare Folge der Transformation (86). Man kann es jedoch auch differentiell aus den Gln. (85) unter Verwendung der JACOBIschen Identität einsehen,

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,[p^H, x^H] &= \left[\frac{\mathrm{d}p^H}{\mathrm{d}t}, x^H\right] + \left[p^H, \frac{\mathrm{d}x^H}{\mathrm{d}t}\right]\\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,([[\mathscr{H}^H, p^H], x^H] + [p^H, [\mathscr{H}^H, x^H]])\\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}^H, [p^H, x^H]] = [\mathscr{H}^H, 1] = 0.\end{aligned}$$

Die totale zeitliche Abhängigkeit $\mathscr{L}^H(t)$ einer beliebigen Observablen $\mathscr{L}(x, p, t)$ erhält man im HEISENBERG-Bild, indem man die Lösungen (86) einsetzt

$$\mathscr{L}^H(t) = \mathscr{L}\left(x^H(t), p^H(t), t\right) = \mathscr{A}^H(t, t_0)\, \mathscr{L}\left(x^H(t_0), p^H(t_0), t\right) \mathscr{A}^{H\dagger}(t, t_0). \tag{87}$$

[Vgl. Gl. (19a)]. Für den HAMILTON-Operator gilt nach Gl. (73*H*) speziell

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{H}^H(t)}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial t}\right)^H_{\mathrm{ex}}. \tag{88}$$

Nur über eine explizite Zeitabhängigkeit ist er eine Funktion der Zeit; andernfalls ist $\mathscr{H}^H$ vermöge der Lösung (85) ein zeitlich konstanter Operator (*Energie-*

satz). In diesem Fall kann der HAMILTON-Operator im SCHRÖDINGER- und HEISENBERG-Bild gleich gewählt werden,

$$\mathscr{H}^H = \mathscr{H}^S. \tag{89}$$

Diese Übereinstimmung überträgt sich *dann* auch auf den integrierenden Operator

$$\mathscr{A}^{H\dagger}(t, t_0) = \mathscr{U}^H(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}^H\cdot(t-t_0)} = \mathscr{U}^S(t, t_0). \tag{90}$$

Die zeitliche Veränderung *der Eigenvektoren* eines (explizit zeitunabhängigen) HERMITEschen Operators $\mathscr{L}$ wird nach Gl. (26) im HEISENBERG-Bild durch den HAMILTON-Operator bestimmt,

$$\frac{\mathrm{d}\,|u_\Lambda^H(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = +\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{H}^H(t)\,|u_\Lambda^H(t)\rangle, \tag{91}$$

bzw. in integraler Form

$$|u_\Lambda^H(t)\rangle = \mathscr{A}^H(t, t_0)\,|u_\Lambda^H(t_0)\rangle. \tag{92}$$

Der *Zustandsvektor* $|\Phi^H\rangle$ hingegen ist im HEISENBERG-Bild zeitlich konstant,

$$|\Phi^H(t)\rangle = |\Phi^H(t_0)\rangle, \tag{93}$$

d. h.

$$\mathscr{C}^H(t, t_0) = \mathbf{1}.$$

Das HEISENBERG-Bild ist also dadurch charakterisiert, daß sich in ihm die Operatoren an dem *ruhenden Zustandsvektor* $|\Phi\rangle$ vorbeibewegen (Fig. 61). Die

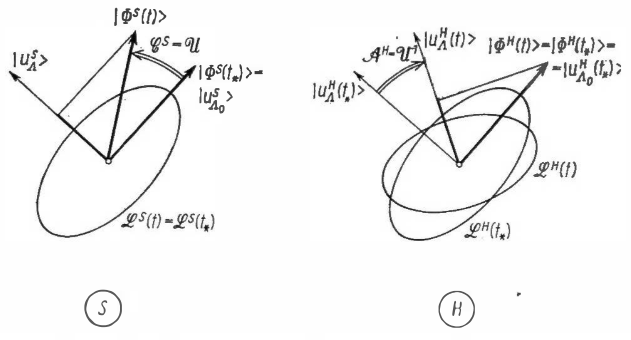


Fig. 61. Gegenüberstellung der Bewegung im SCHRÖDINGER- und HEISENBERG-Bild. In Ⓢ bewegt sich $|\Phi^S(t)\rangle$, während $\mathscr{L}^S$ ruht. In Ⓗ hingegen bewegt sich $\mathscr{L}^H(t)$ und $|\Phi^H\rangle$ ruht. Zur Zeit t_* ist Ⓢ = Ⓗ

Veränderung der Wahrscheinlichkeitsamplituden $\Phi(\Lambda, t) = \langle u_\Lambda^H(t)\,|\,\Phi^H\rangle$ wird völlig durch die Zeitabhängigkeit (92) der Eigenvektoren $|u_\Lambda^H(t)\rangle$ beschrieben. Die daraus resultierende Differentialgleichung für $\Phi(\Lambda, t)$ ist natürlich wieder die bildunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung (43).

Der Zusammenhang zwischen SCHRÖDINGER- *und* HEISENBERG-*Bild* ist zu einem Zeitpunkt t nach Gl. (69) durch

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{L}^S(t) &= \mathscr{U}(t, t_*)\, \mathscr{L}^H(t)\, \mathscr{U}^\dagger(t, t_*), \\ |\Phi^S(t)\rangle &= \mathscr{U}(t, t_*)\, |\Phi^H(t)\rangle \end{aligned}\right\} \quad (94)$$

gegeben, wenn die beiden Bilder zur Zeit t_* übereinstimmten [nach Gl. (66) gilt stets $\mathscr{U}(t, t_*) \equiv \mathscr{U}^H(t, t_*) = \mathscr{U}^S(t, t_*)$].

Beispiel: Behandlung der Bewegung eines freien Teilchens im HEISENBERG-*Bild.* Zur Vertiefung des Verständnisses wollen wir die dynamische Entwicklung der Ortswahrscheinlichkeit im HEISENBERG-Bild behandeln. Für ein freies Teilchen haben
die Bewegungsgleichungen die Lösungen

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\mathscr{p}^H}{\mathrm{d}t} &= \mathscr{O} & \qquad & \mathscr{p}^H(t) = \mathscr{p}^H(t_0) \\ & & \rightarrow & \\ \frac{\mathrm{d}\mathscr{x}^H}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathscr{p}^H}{m} & & \mathscr{x}^H(t) = \mathscr{x}^H(t_0) + \frac{\mathscr{p}^H(t_0)}{m}(t - t_0). \end{aligned}\right\} \quad (95)$$

Die Eigenwertgleichung von $\mathscr{x}^H(t)$,

$$\mathscr{x}^H(t)\,|u_x^H(t)\rangle = \left\{\mathscr{x}^H(t_0) + \frac{\mathscr{p}^H(t_0)}{m}(t - t_0)\right\} |u_x^H(t)\rangle = x\,|u_x^H(t)\rangle,$$

geht bei Multiplikation mit $\langle u_{x'}^H(t_0)|$ über in die Differentialgleichung für die Funktion $u(x', x; t_0, t) = \langle u_{x'}^H(t_0) \mid u_x^H(t)\rangle$ (x'-Darstellung)

$$\left(x' + \frac{t - t_0}{m}\,\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial}{\partial x'}\right) u(x', x; t_0, t) = x\,u(x', x; t_0, t) \quad ^{1)} \qquad (96)$$

mit der Lösung

$$u(x', x; t_0, t) = A \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}\,m}{2\hbar}\,\frac{(x - x')^2}{t - t_0}\right\}. \qquad (97)$$

Die Größe A ist so zu wählen, daß für $t = t_0$ die Funktion $\delta(x - x')$ entsteht. Die Lösung (97) ist offenbar gerade die zu Gl. (50) konjugiert-komplexe Beziehung. Die allgemein gültigen Gl. (47) und (48) erfordern in der Tat die Relation

$$U(x, x'; t, t_0) = \langle u_x^H(t_0) \mid \mathscr{U}^H(t, t_0)\, u_{x'}^H(t_0)\rangle = \langle u_x^H(t) \mid u_{x'}^H(t_0)\rangle = u^*(x', x; t_0, t).$$

d) Die Dynamik im Wechselwirkungsbild (Dirac, Schwinger, Tomonaga)

Um die Überlegungen nicht zu weitschweifig werden zu lassen, wollen wir annehmen, daß in der Zerlegung des HAMILTON-Operators,

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1, \qquad (98)$$

der ungestörte Operator $\mathscr{H}_0$ nicht explizit zeitabhängig ist,

$$\left(\frac{\partial \mathscr{H}_0}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathscr{O}. \qquad (99)$$

---

[1]) Für die Durchführung dieses Beispiels müssen wir einen Vorgriff auf 4.1 § 1 machen, wo gezeigt wird, daß der Impulsoperator in der Ortsdarstellung die Wirkung $\langle u_{x'}| \mathscr{p}\,\varphi\rangle = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}\langle u_{x'}|\,\varphi\rangle}{\mathrm{d}x'}$ hat.

Dann folgt aus Gl. (73 W), daß im Wechselwirkungsbild $\mathcal{H}_0^W$ auch total-zeitlich konstant ist ($\mathcal{H}_0^W = \mathcal{H}_0^S$). Unter dieser Voraussetzung hat der unitäre Operator $\mathcal{A}^W(t, t_0)$ nach Gl. (72 W) die Gestalt

$$\mathcal{A}^W(t, t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0^W \cdot (t-t_0)} . \tag{100}$$

Die Bewegung der Operatoren $x^W(t)$ und $p^W(t)$ wird im Wechselwirkungsbild allein durch den *un*gestörten HAMILTON-Operator $\mathcal{H}_0^W$ bestimmt,

$$\begin{aligned} \frac{dx^W(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\mathcal{H}_0^W, x^W(t)\right] = \left(\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial p}\right)^W(t), \\ \frac{dp^W(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\left[\mathcal{H}_0^W, p^W(t)\right] = -\left(\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial x}\right)^W(t). \end{aligned} \tag{101}$$

Die Operatoren verändern sich so, als ob keine Störung vorhanden wäre,

$$\begin{aligned} x^W(t) &= \mathcal{A}^W(t, t_0)\, x^W(t_0)\, \mathcal{A}^{W\dagger}(t, t_0), \\ p^W(t) &= \mathcal{A}^W(t, t_0)\, p^W(t_0)\, \mathcal{A}^{W\dagger}(t, t_0). \end{aligned} \tag{102}$$

Die totale Zeitfunktion einer beliebigen Observablen $\mathcal{L}(x, p, t)$ erhalten wir im Wechselwirkungsbild durch Einsetzen dieser ungestörten Lösungen,

$$\mathcal{L}^W(t) = \mathcal{L}\left(x^W(t), p^W(t), t\right) = \mathcal{A}^W(t, t_0)\, \mathcal{L}\left(x^W(t_0), p^W(t_0), t\right) \mathcal{A}^{W\dagger}(t, t_0). \tag{103}$$

Setzt man in Gln. (19) und (19a) $\mathcal{X} = \mathcal{H}_0^W$, so hat man eine Reihenentwicklung für $x^W(t)$, $p^W(t)$ und $\mathcal{L}^W(t)$ vorliegen.

Eine besondere Beachtung verdient im Wechselwirkungsbild die Dynamik des Gesamt-HAMILTON-Operators $\mathcal{H}^W(t)$,

$$\frac{d\mathcal{H}^W(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\mathcal{H}_0^W, \mathcal{H}_1^W(t)\right] + \left(\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial t}\right)_{ex}^W(t) = \frac{d\mathcal{H}_1^W(t)}{dt}, \tag{104}$$

der im Gegensatz zum HEISENBERG- oder SCHRÖDINGER-Bild *selbst dann zeitabhängig* ist, wenn $\left(\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial t}\right)_{ex}$ verschwindet, weil $\mathcal{H}_0^W$ im allgemeinen nicht mit $\mathcal{H}_1^W(t)$ vertauschbar ist.

Die zeitliche Veränderung der *Eigenvektoren* $|u_\Lambda^W(t)\rangle$ eines (explizit zeitunabhängigen) Operators $\mathcal{L}$ lautet im Wechselwirkungsbild

$$\frac{d\,|u_\Lambda^W(t)\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\, \mathcal{H}_0^W\, |u_\Lambda^W(t)\rangle \tag{105}$$

bzw. in integraler Form

$$|u_\Lambda^W(t)\rangle = \mathcal{A}^W(t, t_0)\, |u_\Lambda^W(t_0)\rangle. \tag{106}$$

Die Dynamik des *Zustandsvektors* $|\Phi^W(t)\rangle$ im Wechselwirkungsbild wird nach Gl. (75 W) durch den Störoperator $\mathcal{H}_1^W(t)$ bestimmt,

$$\frac{d\,|\Phi^W(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\, \mathcal{H}_1^W(t)\, |\Phi^W(t)\rangle. \tag{107}$$

Dabei ist zu beachten, daß der Operator $\mathscr{H}_1^W(t)$ auch dann *zeitlich veränderlich* ist, wenn $\mathscr{H}_1$ selbst explizit zeitunabhängig ist, weil in [Gl. (104)] die Dynamik durch $\mathscr{H}_0^W$ bestimmt wird. *Es ist also in der Gl.* (107) *die Zeitabhängigkeit*

$$\mathscr{H}_1^W(t) = \mathscr{H}_1\big(x^W(t), p^W(t), t\big) = \mathscr{A}^W(t, t_0)\, \mathscr{H}_1\big(x^W(t_0), p^W(t_0), t\big)\, \mathscr{A}^{W\dagger}(t, t_0) \tag{108}$$

einzusetzen!

Wegen dieser Zeitabhängigkeit läßt sich der integrierende Operator $\mathscr{C}^W(t, t_0)$ nicht als einfache Exponentialfunktion von $\mathscr{H}_1^W$ ausdrücken. Wir werden hierauf im nächsten Paragraph näher eingehen. Durch die Beziehung

$$\mathscr{C}^W(t, t_0) = \mathscr{A}^W(t, t_0)\, \mathscr{U}^W(t, t_0) \tag{109}$$

kann man jedoch andererseits $\mathscr{C}^W$ durch $\mathscr{H}_0^W$ und $\mathscr{H}^W(x(t_0), p(t_0), t)$ darstellen. Ist insbesondere der Gesamt-HAMILTON-Operator explizit zeitunabhängig, so gilt nach Gl. (38)

$$\mathscr{U}^W(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}^W(t_0)\cdot(t-t_0)}, \tag{110}$$

und man erhält für

$$\mathscr{C}^W(t, t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^W\cdot(t-t_0)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}^W(t_0)\cdot(t-t_0)}, \tag{111}$$

das ist Gl. (39) im Wechselwirkungsbild.

Zusammenhang zwischen SCHRÖDINGER- *und Wechselwirkungsbild.* Ist das Wechselwirkungsbild zur Zeit t_* mit dem SCHRÖDINGER-Bild identisch, so herrscht nach Gl. (69) zur Zeit t der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \mathscr{L}^W(t) &= \mathscr{A}^W(t, t_*)\, \mathscr{L}^S(t)\, \mathscr{A}^{W\dagger}(t, t_*), \\ |\Phi^W(t)\rangle &= \mathscr{A}^W(t, t_*)\, |\Phi^S(t)\rangle. \end{aligned} \tag{112}$$

Transformiert man die rechte Seite von Gl. (111) unter Beachtung von Gl. (100) in das SCHRÖDINGER-Bild, so erhält man für $\mathscr{C}^W(t, t_0)$ eine Darstellung durch die zeitunabhängigen HAMILTON-Operatoren $\mathscr{H}_0^S$ und $\mathscr{H}^S$,

$$\mathscr{C}^W(t, t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^S\cdot(t-t_*)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}^S\cdot(t-t_0)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^S\cdot(t_0-t_*)}, \tag{113}$$

die in der Streutheorie (4.7 § 4) Verwendung findet.

Zwischen dem HEISENBERG- *und dem Wechselwirkungsbild* bestehen die Beziehungen

$$\begin{aligned} \mathscr{L}^W(t) &= \mathscr{C}^W(t, t_*)\, \mathscr{L}^H(t)\, \mathscr{C}^{W\dagger}(t, t_*), \\ |\Phi^W(t)\rangle &= \mathscr{C}^W(t, t_*)\, |\Phi^H(t)\rangle. \end{aligned} \tag{114}$$

Aufg. 73: Wie lauten im SCHRÖDINGER-, HEISENBERG- und Wechselwirkungsbild die Bewegungsgleichungen für ein Teilchen, das sich unter dem Einfluß einer konstanten Kraft befindet?

Aufg. 74: Wie lauten für den harmonischen Oszillator die Operatoren $x^H(t)$ und $p^H(t)$, wenn sie zur Zeit t_0 bekannt sind?

Aufg. 75: Man bestimme den Kommutator

$$[x^H(t), x^H(t_0)]$$

für ein freies Teilchen und für den harmonischen Oszillator.

Weitere Beispiele zur quantentheoretischen Dynamik bieten die Aufg. 96 und 105, sowie Kap. 4.7.

§ 7. Die Integration der Operator-Differentialgleichung 1. Ordnung

Die unitären Operatoren $\mathscr{A}$ und $\mathscr{C}$ wurden durch Differentialgleichungen der Gestalt

$$\frac{d\mathscr{Y}(t, t_0)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \mathscr{H}(t) \mathscr{Y}(t, t_0) \tag{115}$$

definiert. Diese Operator-Differentialgleichung integrierten wir bisher nur für den Fall, daß $\mathscr{H}$ zeitunabhängig war.

Zunächst könnte man vermuten, daß im allgemeinen Fall der Ansatz

$$\mathscr{Y} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathscr{B}(t)}$$

zum Ziele führt. Es ist aber zu beachten, daß i. allg.

$$\dot{\mathscr{Y}} \neq \frac{i}{\hbar} \dot{\mathscr{B}} \mathscr{Y}$$

ist, weil $\dot{\mathscr{B}}$ nicht mit $\mathscr{B}$ vertauschbar zu sein braucht. [1]) Es ist daher auch i. allg. $\mathscr{B} \neq \int \mathscr{H}\, dt$.

Durch Integration über t verwandeln wir die Differentialgleichung (115) zunächst in eine *Integralgleichung* für $\mathscr{Y}(t, t_0)$

$$\boxed{\mathscr{Y}(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \mathscr{H}(t_1) \mathscr{Y}(t_1, t_0)\, dt_1} \,. \tag{116}$$

Dabei ist berücksichtigt, daß $\mathscr{Y}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ ist. Zur Lösung der Integralgleichung bedienen wir uns eines Iterationsverfahrens. Für $t = t_0$ erhalten wir die nullte Näherung

$$\mathscr{Y}_0 = \mathbb{1}\,.$$

Für kleine Zeitdifferenzen $t - t_0$ werden wir eine gute Näherungslösung erhalten, wenn wir auf der rechten Seite von (116) $\mathscr{Y}$ durch $\mathscr{Y}_0$ ersetzen,

$$\mathscr{Y}_1(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \mathscr{H}(t_1)\, dt_1 \,. \tag{117}$$

[1]) Entwickelt man die Exponentialfunktion in eine Reihe, so zeigt schon die Differentiation des dritten Gliedes, $i^2(\mathscr{B}\dot{\mathscr{B}} + \dot{\mathscr{B}}\mathscr{B})/2\hbar^2$, daß man für $[\mathscr{B}, \dot{\mathscr{B}}] \neq \mathcal{O}$ nicht zu dem angestrebten Ergebnis gelangt.

In der nächsten Näherung setzen wir jetzt dieses Ergebnis wieder auf der rechten Seite von (116) für $\mathcal{Y}$ ein,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{Y}_2(t, t_0) &= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{Y}_1(t_1, t_0)\, dt_1 \\
&= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_1=t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1) \left\{ 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_2=t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_2)\, dt_2 \right\} dt_1 \\
&= 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_1=t_0}^{t} \mathcal{H}(t_1)\, dt_1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_1=t_0}^{t} \int_{t_2=t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2)\, dt_2\, dt_1,
\end{aligned}
\tag{118}
$$

usw. in höherer Näherung. Im Doppelintegral, das sich über das in Fig. 62 schraffierte Dreieck erstreckt, ist zu beachten, daß im allgemeinen $\mathcal{H}(t_1)\,\mathcal{H}(t_2) \neq \mathcal{H}(t_2)\,\mathcal{H}(t_1)$ ist. Die Vertauschung der Integrationsvariablen $t_1 \to t_2$ und $t_2 \to t_1$ ergibt

$$
\begin{aligned}
\mathcal{I} &= \int_{t_1=t_0}^{t} \int_{t_2=t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2)\, dt_2\, dt_1 \\
&= \int_{t_2=t_0}^{t} \int_{t_1=t_0}^{t_2} \mathcal{H}(t_2)\, \mathcal{H}(t_1)\, dt_1\, dt_2,
\end{aligned}
$$

Fig. 62. Zur Auswertung des Doppelintegrals Gl. (118)

d. h., man integriert jetzt im weißen Dreieck zuerst horizontal. Zum gleichen Ergebnis gelangt man aber auch, wenn man im weißen Dreieck zuerst vertikal integriert

$$
\mathcal{I} = \int_{t_1=t_0}^{t} \int_{t_2=t_1}^{t} \mathcal{H}(t_2)\, \mathcal{H}(t_1)\, dt_2\, dt_1 .
$$

Wir können daher für das Doppelintegral in (118) schreiben

$$
\mathcal{I} = \frac{1}{2} \int_{t_1=t_0}^{t} \left(\int_{t_2=t_0}^{t_1} \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2)\, dt_2 + \int_{t_2=t_1}^{t} \mathcal{H}(t_2)\, \mathcal{H}(t_1)\, dt_2 \right) dt_1 . \tag{119}
$$

Wäre die Reihenfolge der Faktoren belanglos, so könnte man $\mathcal{I}$ als das halbe Integral über das Quadrat lesen. Dies gelingt auch im vorliegenden Fall, wenn man einen „chronologischen Operator" T mit der Eigenschaft

$$
\mathrm{T}\, \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2) = \begin{cases} \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2) & \text{für } t_1 \geqq t_2 \\ \mathcal{H}(t_2)\, \mathcal{H}(t_1) & \text{für } t_2 \geqq t_1 \end{cases} \tag{120}
$$

einführt. Gl. (119) kann dann in der Form

$$
\mathcal{I} = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} \mathrm{T}\, \mathcal{H}(t_1)\, \mathcal{H}(t_2)\, dt_1\, dt_2 \tag{121}
$$

geschrieben werden.

Analoge Überlegungen lassen sich auch für die höheren Näherungen anstellen. Mit einem Operator T, der ein mehrfaches Operatorprodukt in der Reihenfolge

abnehmender Zeiten von links nach rechts chronologisch ordnet, lautet das exakte Ergebnis nach unendlich vielen Schritten (bei Konvergenz des Verfahrens)

$$\mathscr{Y}(t, t_0) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^{\nu} \frac{1}{\nu!} \int_{t_0}^{t} \cdots \int \mathrm{T}\, \mathscr{H}(t_1) \cdots \mathscr{H}(t_\nu)\, \mathrm{d}t_1 \cdots \mathrm{d}t_\nu .$$

Hierfür schreibt man auch formal

$$\boxed{\mathscr{Y}(t, t_0) = \mathrm{T}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathscr{H}(t')\mathrm{d}t'}} . \tag{122}$$

Ist der HAMILTON-Operator zu verschiedenen Zeiten vertauschbar, z. B. $\mathscr{H}(t) = \mathscr{k} f(t)$, so kann man den chronologischen Operator T natürlich weglassen.

§ 8. Die Diracsche Störungstheorie

a) Allgemeine Formulierung

An einem System seien zur Zeit $t_0 = 0$ ein Eigenwert E_a des (explizit zeitunabhängigen) HAMILTON-Operators $\mathscr{H}_0$,

$$\mathscr{H}_0 \,|u_a(0)\rangle = E_a \,|u_a(0)\rangle , \tag{123}$$

und die Eigenwerte eines mit $\mathscr{H}_0$ vertauschbaren, vollständigen Satzes von Observablen gemessen worden. Der Zustandsvektor des Systems ist zu diesem Zeitpunkt also ein Energieeigenvektor,

$$|\Phi(0)\rangle = |u_a(0)\rangle . \tag{124}$$

Für Zeiten $t > 0$ wirke neben $\mathscr{H}_0$ eine *Störung* $\mathscr{H}_1$, so daß die Dynamik des Systems durch

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1 \tag{125}$$

bestimmt wird. *Das System bleibt daher nicht in dem Zustand* (124). *Wir wollen die Wahrscheinlichkeit dafür berechnen, daß bei einer erneuten Messung des ungestörten* HAMILTON-*Operators* $\mathscr{H}_0$ *und der damit vertauschbaren Observablen zur Zeit* t *ein Zustand* $|u_b(t)\rangle$ *eintritt.*[1]) Nach Gl. (45) ist diese Wahrscheinlichkeit in irgendeinem Bild durch

$$\boxed{\begin{aligned} w_{a\to b}(t) &= |\langle u_b(t) \,|\, \Phi(t)\rangle|^2 \\ &= |\langle u_b(0)|\, \mathscr{U}(t,0)\, u_a(0)\rangle|^2 \\ &= |U(b, a; t)|^2 \end{aligned}} , \tag{126}$$

d. h. durch das Absolutquadrat der Matrixelemente von $\mathscr{U}(t, 0)$ in der $\mathscr{H}_0$-Darstellung gegeben. Ist der Zustand $|u_b\rangle \neq |u_a\rangle$, so nennt man $w_{a\to b}$ die *Übergangswahrscheinlichkeit* vom Zustand $|u_a\rangle$ in den Zustand $|u_b\rangle$. Die Größe $w_{a\to a}$

[1]) Unvollständige Messungen werden in Aufg. 83 behandelt.

hingegen gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß das System im Ausgangszustand $|u_a\rangle$ verblieben ist (*Verweilwahrscheinlichkeit*).

Ein wichtiges Beispiel ist die *Strahlungstheorie:* Der ungestörte HAMILTON-Operator $\mathscr{H}_0$ besteht aus 2 Anteilen

$$\mathscr{H}_0 = \mathscr{H}_0^{\mathrm{el}} + \mathscr{H}_0^{\mathrm{ph}}.$$

$\mathscr{H}_0^{\mathrm{el}}$ ist der HAMILTON-Operator der Elektronen im Atomverband, $\mathscr{H}_0^{\mathrm{ph}}$ jener der Photonen (quantisiertes elektromagnetisches Feld ohne Quellen). Nach der Elektrodynamik besteht eine Wechselwirkung $\mathscr{H}_1$ zwischen den Ladungen und dem elektromagnetischen Feld. Diese bewirkt, daß ein Eigenzustand von $\mathscr{H}_0$ (Energieeigenzustand von Elektronen + Photonen) nicht stationär ist: Es besteht eine Wahrscheinlichkeit für den Übergang in einen anderen Elektronenzustand bei gleichzeitiger Emission (oder Absorption) von Photonen.

Die Wahrscheinlichkeiten (126) lassen sich in den wenigsten Fällen exakt berechnen. Nimmt man jedoch an, daß $\mathscr{H}_1$ eine kleine Störung ist — was „klein" heißen soll, werden wir noch sehen —, so kann man eine Näherungsformel ableiten. Diese DIRACsche *Störungstheorie* gewinnt man am einfachsten, indem man in das Wechselwirkungsbild geht,

$$\mathscr{U}^W(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^W t}\,\mathscr{C}^W(t, 0), \tag{127}$$

und für den unitären Operator $\mathscr{C}^W$ nur die ersten Glieder der Entwicklung nach $\mathscr{H}_1^W(t)$ [Gl. (118)],

$$\mathscr{C}^W(t, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathscr{H}_1^W(t_1)\,dt_1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_1=0}^{t}\int_{t_2=0}^{t_1} \mathscr{H}_1^W(t_1)\,\mathscr{H}_1^W(t_2)\,dt_2\,dt_1 + \cdots, \tag{128}$$

berücksichtigt. Die Zeitabhängigkeit von $\mathscr{H}_1^W(t)$ ist nach Gl. (108) durch

$$\mathscr{H}_1^W(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^W t}\,\mathscr{H}_1\big(x^W(0),\ p^W(0), t\big)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0^W t} \tag{129}$$

bestimmt.

Meistens liest man die DIRACsche Störungstheorie im SCHRÖDINGER-Bild. Dabei richtet man es so ein, daß das Wechselwirkungsbild mit dem SCHRÖDINGER-Bild zur Zeit $t_* = t_0 = 0$ übereinstimmt. Lassen wir der Kürze halber im folgenden den *Index S weg*, so erhalten wir

$$\mathscr{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0 t}\Big\{1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0 t_1}\,\mathscr{H}_1(t_1)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0 t_1}\,dt_1$$
$$- \frac{1}{\hbar^2}\int_{t_1=0}^{t}\int_{t_2=0}^{t_1} e^{\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0 t_1}\,\mathscr{H}_1(t_1)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0(t_1-t_2)}\,\mathscr{H}_1(t_2)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}_0 t_2}\,dt_2\,dt_1 + \cdots\Big\}. \tag{130}$$

$\mathscr{H}_1(t)$ deutet dabei also allein eine evtl. vorhandene explizite Zeitabhängigkeit der Störung an.

Die Matrixelemente von $\mathcal{U}$ in der $\mathcal{H}_0$-Darstellung lassen sich sofort anschreiben, weil in ihr der Operator $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}$ diagonal ist,

$$\boxed{\begin{aligned} U(b, a; t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_b t} \Big\{ & \delta(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ba}t_1} H_1(b, a; t_1)\, dt_1 \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_1=0}^{t} \int_{t_2=0}^{t_1} \sum\!\!\!\!\!\!\int_c e^{i\omega_{bc}t_1} H_1(b, c; t_1)\, H_1(c, a; t_2)\, e^{i\omega_{ca}t_2}\, dc\, dt_2\, dt_1 + \cdots \Big\} \end{aligned}} \quad (131)$$

Dabei führten wir für die Energiedifferenzen des ungestörten HAMILTON-Operators

$$\omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar} \quad (132)$$

als Abkürzung ein. Zur Auswertung der Matrixelemente unter dem Doppelintegral wurden in Gl. (130) alle Eigenvektoren $|u_c\rangle$ von $\mathcal{H}_0$ als Zwischenzustände eingeschoben,

$$1 = \sum\!\!\!\!\!\!\int_c |u_c\rangle \langle u_c|\, dc.$$

Für die Matrixelemente von $\mathcal{H}_1(t)$ in der $\mathcal{H}_0$-Darstellung haben wir

$$\langle u_b | \mathcal{H}_1(t)\, u_a\rangle = H_1(b, a; t) \quad (133)$$

geschrieben.

Für die *Übergangswahrscheinlichkeiten* $w_{a\to b}$ verschwindet der erste Term der Entwicklung (131). Berücksichtigt man nur das einfache Integral, so wird man dem Einfluß der Störung in erster Ordnung gerecht,

$$w^{(1)}_{a\to b}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{ba}t_1} H_1(b, a; t_1)\, dt_1 \right|^2 \qquad (|u_a\rangle \neq |u_b\rangle). \quad (134)$$

Nimmt man auch noch das Doppelintegral hinzu, so gelangt man zur Störungstheorie zweiter Ordnung. Diese Näherung ist vor allem dann wichtig, wenn das Matrixelement $H_1(b, a; t)$ zwischen den Zuständen $|u_a\rangle$ und $|u_b\rangle$ verschwindet, so daß sich in erster Näherung keine Übergangswahrscheinlichkeit ergibt. In diesem Fall[1]) ist dann

$$w^{(2)}_{a\to b}(t) = \frac{1}{\hbar^4} \left| \int_{t_1=0}^{t} \int_{t_2=0}^{t_1} \sum\!\!\!\!\!\!\int_c e^{i(\omega_{bc}t_1 + \omega_{ca}t_2)} H_1(b, c; t_1)\, H_1(c, a; t_2)\, dc\, dt_2\, dt_1 \right|^2. \quad (135)$$

Die *Verweilwahrscheinlichkeit* erster Ordnung ist durch

$$w^{(1)}_{a\to a}(t) = 1 - \sum\!\!\!\!\!\!\int_{b(\neq a)} w^{(1)}_{a\to b}(t)\, db \quad (136)$$

---

[1]) Verschwinden die Matrixelemente $H_1(b, a; t)$ nicht, so muß man natürlich in der Störungstheorie zweiter Ordnung von der Summe der beiden Terme das Absolutquadrat bilden, d. h., es ergibt sich zusätzlich zu (134) und (135) ein Interferenzterm.

gegeben, weil die Summe aller Wahrscheinlichkeiten eins sein soll. Diesen Ausdruck erhält man *nicht* einfach dadurch, daß man in (134) $b = a$ setzt. Weil für die Verweilwahrscheinlichkeit der erste Term in (131) eins wird, ist es nämlich für $w^{(1)}_{a \to a}$ nötig, von (131) auch das dritte Glied mit zu berücksichtigen und bei der Bildung des Absolutquadrates bis zu quadratischen Termen in der Störung zu entwickeln. Dies führt dann gerade wieder auf die Darstellung (136). Entsprechendes gilt für die Verweilwahrscheinlichkeit zweiter Ordnung.

Die Ergebnisse der Störungstheorie niedriger Ordnung sind im allgemeinen nur dann sinnvoll, wenn die Wirkung der Störung $\mathscr{H}_1$ nicht groß ist, d. h., wenn für die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$w_{a \to b}(t) \ll 1$$

und für die Verweilwahrscheinlichkeiten

$$w_{a \to a}(t) \approx 1 \tag{137}$$

gilt. Das heißt, der Anfangszustand $|u_a\rangle$ muß noch mit überwiegender Wahrscheinlichkeit besetzt sein. Da man unter der *Lebensdauer* τ_a gerade die Zeit versteht, in der ein Zustand $|u_a\rangle$ unter dem Einfluß einer Störung $\mathscr{H}_1$ merklich zerfällt, ist also die Gültigkeit der DIRACschen Störungstheorie auf Zeiten

$$t \ll \tau_a \tag{138}$$

beschränkt. Die Lebensdauer selbst läßt sich mit ihr nicht berechnen[1]) (vgl. § 9).

b) Zeitlich konstante Störung

Wir betrachten den Fall, daß $\mathscr{H}_1$ explizit von der Zeit nicht abhängig ist. Es lassen sich dann die Zeitintegrale auswerten,

$$U(b, a; t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_b t} \left\{ \delta(b, a) - \frac{H_1(b, a)}{\hbar} \frac{e^{i\omega_{ba} t} - 1}{\omega_{ba}} \right.$$
$$\left. + \frac{1}{\hbar^2} \sum\!\!\!\!\!\!\int_c \frac{H_1(b, c)\, H_1(c, a)}{\omega_{ca}} \left[\frac{e^{i\omega_{ba} t} - 1}{\omega_{ba}} - \frac{e^{i\omega_{bc} t} - 1}{\omega_{bc}} \right] dc + \cdots \right\}. \tag{139}$$

Berücksichtigt man die Identität

$$e^{ix} - 1 = 2i e^{\frac{ix}{2}} \sin \frac{x}{2},$$

[1]) Neben der DIRACschen Störungstheorie gibt es ein von WIGNER und WEISSKOPF sowie von HEITLER entwickeltes Näherungsverfahren, das auch für große Zeiten Gültigkeit bewahrt. Mit diesem ist man imstande, eine Beziehung für die Lebensdauer anzugeben. [Vgl. z. B. M. GOLDBERGER u. K. WATSON, Collision Theory, 1964, New York—London—Sydney].

so liefert das zweite Glied in Gl. (139) *die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Näherung*

$$\boxed{w^{(1)}_{a\to b}(t) = \frac{|H_1(b,a)|^2}{\hbar^2}\left(\frac{\sin\frac{\omega_{ab}}{2}t}{\frac{\omega_{ab}}{2}}\right)^2} \qquad (|u_b\rangle \neq |u_a\rangle). \tag{140}$$

Aus dem Verlauf der Funktion $f(\omega, t) = \left(\frac{\sin\omega t/2}{\omega/2}\right)^2$ (Fig. 63) folgt, daß die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang am größten ist für $E_b - E_a = 0$, wenn also die Energie des Endzustandes mit der des Ausgangszustandes übereinstimmt. Da $|u_b\rangle \neq |u_a\rangle$ sein soll, heißt das, daß es sich dabei um einen Übergang zwischen *entarteten* Zuständen von $\mathscr{H}_0$ handelt. Die Wahrscheinlichkeit, einen Energiezustand $E_b \neq E_a$ anzutreffen, ist im wesentlichen nur im Gebiet $|\omega_{ab}| \lesssim 2\pi/t$, d. h. für $|E_a - E_b| \lesssim 2\pi\,\hbar/t$ gegeben. Mit zunehmender Zeit t wird also die Wahrscheinlichkeit, einen Energiewert $E_b \neq E_a$ anzutreffen, immer kleiner.

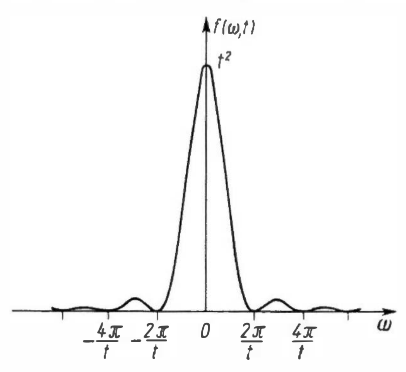


Fig. 63. Die Funktion $f(\omega, t) = \left(\frac{\sin\omega t/2}{\omega/2}\right)^2$

Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang in ein Energieintervall ΔE_b ist [Gl. (3.3–37)]

$$w_{a\to\Delta E_b} = \sum_{b \text{ in } \Delta E_b} w_{a\to b}. \tag{141}$$

Liegt ein Kontinuum oder Quasikontinuum [vgl. z. B. Gl. (1.5–68)] von Energieeigenwerten E_b vor, so geht die Summe über in ein Integral

$$w_{a\to\Delta E_b} = \int_{\Delta E_b} w_{a\to b}\,\varrho(E_b)\,\mathrm{d}E_b. \tag{142}$$

Dabei ist $\varrho(E_b)$ die Dichte der Energiezustände, d. h. $\varrho(E_b)\,\mathrm{d}E_b$ die Anzahl der Energiezustände im Intervall $\mathrm{d}E_b$.

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist wegen des Verlaufs der Funktion $f(\omega, t)$ nur dann wesentlich von Null verschieden, wenn ΔE_b eine Umgebung von E_a ist (Fig. 64.1). Wählt man dieses Intervall

$$\Delta E_b > \frac{2\pi}{t}\,\hbar, \tag{143}$$

so macht es kaum einen Unterschied, ob man die Integration nur über dieses Intervall oder über alle Energiewerte erstreckt. Nimmt man außerdem den wenig veränderlichen Anteil $|H_1(b, a)|^2\,\varrho(E_b)$ an der Stelle $E_b \approx E_a$ und zieht

diesen vor das Integral, so erhält man

$$w^{(1)}_{a\to\Delta E_b} = \frac{1}{\hbar^2}\,|H_1(b,a)|^2\,\varrho(E_b)\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\sin\frac{\omega_{ab}\,t}{2}}{\frac{\omega_{ab}}{2}}\right)^2 \mathrm{d}(\hbar\,\omega_{ab}).$$

Wegen

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\sin\xi}{\xi}\right)^2 \mathrm{d}\xi = \pi$$

ergibt sich daher ($\xi = \omega_{ab}\,t/2$) als *Übergangswahrscheinlichkeit erster Ordnung*

$$\boxed{w^{(1)}_{a\to\Delta E_b} = \frac{2\pi}{\hbar}\,|H_1(b,a)|^2\,\varrho(E_b)\,t}\,,\quad (E_b \approx E_a). \tag{144}$$

Dieser Sachverhalt bedeutet, daß man Gl. (140) für kontinuierliche Zustände bei entsprechend großen Zeiten [Gl. (143)] in der Form

$$w^{(1)}_{a\to b}(t) = \frac{2\pi}{\hbar}\,|H_1(b,a)|^2\,t\,\delta(E_a - E_b) \tag{144'}$$

schreiben kann, wobei von der Darstellung (5.1–11$_2$) der δ-Funktion Gebrauch gemacht wurde. Die Integration über die Zustände b des Intervalls ΔE_b liefert wieder das Ergebnis (144).

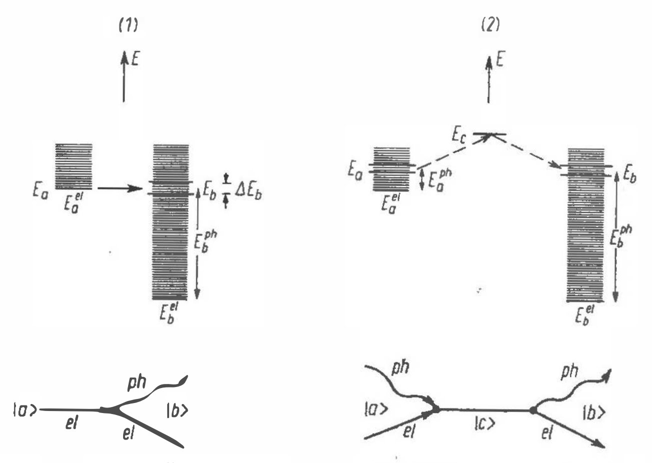


Fig. 64. Elektron-Photon-Übergänge in DIRACscher Störungstheorie 1. und 2. Ordnung

Im oben erwähnten Beispiel der *Strahlung* bedeutet die Übereinstimmung von E_a mit E_b, daß die Summe der Energien der Elektronen und Photonen am Anfang ($E_a = E_a^{\mathrm{el}} + E_a^{\mathrm{ph}}$) gleich jener nach der Emission (oder Absorption) eines Photons ($E_b = E_b^{\mathrm{el}} + E_b^{\mathrm{ph}}$) ist. Die Energie ($= \hbar\,\omega$) des emittierten (oder absorbierten) Photons stimmt mit der Änderung der Elektronenenergie überein, wir werden also auf die BOHRsche *Frequenzbedingung* geführt (Fig. 64.1).

Die „goldene Regel“ (144) ist nach Gl. (138) und (143) für Zeiten

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta E} < t \ll \tau_a \tag{145}$$

gültig. Die Matrixelemente $H_1(b, a)$ der Störung, gebildet mit den ungestörten Anfangs- und Endzuständen, bestimmen also die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen diesen Zuständen. Es kann sein, daß diese Matrixelemente für bestimmte Anfangs- und Endzustände Null werden. Durch Symmetriebetrachtungen (3.6 § 8) lassen sich diese verschwindenden Matrixelemente in konkreten Fällen meist ohne explizite Rechnung bestimmen („*Auswahlregeln*“) [vgl. Aufg. 102]. Die in erster Ordnung verbotenen Übergänge können natürlich in zweiter oder höherer Ordnung der Störungsrechnung erlaubt sein.

Wir betrachten den für die *zweite Ordnung* maßgebenden Term von Gl. (139),

$$\frac{1}{\hbar^2} \sum\!\!\!\!\!\!\int_c \frac{H_1(b, c)\, H_1(c, a)}{\omega_{ca}} \left[\frac{e^{i\omega_{ba}t} - 1}{\omega_{ba}} - \frac{e^{i\omega_{bc}t} - 1}{\omega_{bc}}\right] dc\,.$$

Zunächst bemerken wir, daß für $\omega_{ca} \approx 0$ keine Singularität auftritt, weil in diesem Fall ($\omega_{ba} \approx \omega_{bc}$) die eckige Klammer selbst proportional zu ω_{ca} wird. Für $\omega_{bc} \approx 0$ scheint das zweite Glied innerhalb der Klammer einen Beitrag zu liefern, für den die Energieerhaltung zwischen Anfangs- und Endzustand nicht gewährleistet zu sein braucht. Wie man aus dem obigen Integrationsverfahren sieht, ist es eine Folge des plötzlichen Einschaltens zur Zeit $t = 0$. Es verschwindet — wie bei allen Einschwingvorgängen — wegen der Dämpfung, die hier durch die endliche Lebensdauer τ bedingt ist. In dem in Fußnote[1]), S. 227, zitierten WIGNER-WEISSKOPF-HEITLER-Verfahren zeigt sich in der Tat, daß dieser Term vernachlässigbar ist.

Die wesentlichen Übergänge bestimmt also allein das erste Glied in der Klammer: Für $\omega_{ba} \approx 0$ ergibt sich — wie in der Störungstheorie erster Ordnung — die größte Wahrscheinlichkeit, d. h. wenn der Endzustand E_b in der Nähe des Anfangszustandes E_a liegt (Energieerhaltung zwischen Anfangs- und Endzustand). Verfährt man mit dem Zeitfaktor $(e^{i\omega_{ba}t} - 1)/\omega_{ba}$ genauso wie bei der Herleitung der Gl. (144), so erhält man

$$w^{(2)}_{a\to\Delta E_b}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum\!\!\!\!\!\!\int_c \frac{H_1(b, c)\, H_1(c, a)}{E_c - E_a}\, dc \right|^2 \varrho(E_b)\, t, \quad (E_a \approx E_b)\,. \tag{146}$$

Die störungstheoretische Übergangswahrscheinlichkeit zweiter Ordnung ergibt sich also formal aus der erster Ordnung, indem man den Operator $\mathscr{H}_1$ durch

$$\boxed{\mathscr{H}_1 \to \sum\!\!\!\!\!\!\int_c \frac{|\mathscr{H}_1 u_c\rangle\langle u_c \mathscr{H}_1|}{E_c - E_a}\, dc = \mathscr{H}_1 \frac{1}{\mathscr{H}_0 - E_a 1} \mathscr{H}_1} \tag{147}$$

ersetzt. Die Summation c erstreckt sich dabei über alle Eigenzustände $|u_c\rangle$ von $\mathscr{H}_0$.[1]) Man interpretiert diese Formel häufig dadurch, daß man sagt, daß das System „*virtuell*" vom Anfangszustand $|u_a\rangle$ in den Zwischenzustand $|u_c\rangle$ und dann von dort zum Endzustand $|u_b\rangle$ „übergehe" (Fig. 64.2). Diese dem Rechenergebnis angepaßte Redeweise bedeutet jedoch *nicht*, daß man dabei das System in einem solchen Zwischenzustand tatsächlich durch eine physikalische Meßapparatur nachweisen könnte. Für die einzelnen virtuellen „Übergänge" $|u_a\rangle \to |u_c\rangle \to |u_b\rangle$ ist der Energiesatz nicht erfüllt, wohl aber zwischen den physikalisch realen Anfangs- und Endzuständen.

In vielen praktischen Fällen genügt es, allein solche $|u_c\rangle$ zu berücksichtigen, die einerseits von Null verschiedene Matrixelemente liefern, deren Energie E_c andererseits aber wegen des Nenners $E_c - E_a$ nicht allzusehr von E_a verschieden ist. — Liegen die Anfangs- und Endzustände gerade so, daß ihre Energie mit der eines Zwischenzustandes übereinstimmt

$$E_a \approx E_b \approx E_c,$$

$$|u_a\rangle \neq |u_b\rangle \neq |u_c\rangle,$$

so divergiert der Ausdruck (146). In diesem Fall der „*Resonanzfluoreszenz*" muß man die durch das oben zitierte WIGNER-WEISSKOPF-HEITLER-Verfahren bestimmbare *Lebensdauer* des Zustandes $|u_c\rangle$ berücksichtigen. Wir wollen hierauf jedoch nicht weiter eingehen.

§ 9. Lebensdauer und Linienbreite

Unter der Lebensdauer τ eines Eigenzustandes von $\mathscr{H}_0$ definierten wir die Zeit, innerhalb der die Verweilwahrscheinlichkeit $w_{a\to a}(t)$ merklich abgenommen hat. Um diese Zeit *abzuschätzen*, fügen wir in den exakten Ausdruck (126) für die Verweilwahrscheinlichkeit

$$w_{a\to a}(t) = |\langle u_a|\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}t}\, u_a\rangle|^2 \tag{148}$$

als Zwischenzustände die Eigenvektoren $|u_E\rangle$ des *Gesamt*-HAMILTON-Operators $\mathscr{H}$ ein und erhalten

$$\begin{aligned} w_{a\to a}(t) &= \left| \sum_E\!\!\!\!\!\!\int \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \langle u_a \mid u_E\rangle \langle u_E \mid u_a\rangle\, \mathrm{d}E \right|^2 \\ &= \left| \sum_E\!\!\!\!\!\!\int \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} |u_a(E)|^2\, \mathrm{d}E \right|^2 . \quad ^{2)} \end{aligned} \tag{149}$$

Für die $\mathscr{H}_0$-Eigenfunktionen $u_a(E)$ in der Gesamtenergiedarstellung nehmen wir den in Fig. 65 angegebenen Verlauf an. Wäre $u_a(E)$ ein Eigenzustand der Ge-

[1]) Die Matrixelemente, in denen $|u_c\rangle = |u_a\rangle$ bzw. $= |u_b\rangle$ ist, treten in der Summe (146) nicht auf, weil vorausgesetzt wurde, daß das Matrixelement $H_1(a, b)$ verschwindet.

[2]) Ist E entartet, so tritt an Stelle von $|u_a(E)|^2$ die Summe $\sum_\mu |u_a(E,\mu)|^2$ (μ = Entartungsindex).

samtenergie, so wäre $u_a(E) = \delta(E_a, E)$. Die Breite ε ist also ein Maß für die Abweichung von $\mathscr{H}_0$ gegenüber $\mathscr{H}$.

Für $t = 0$ befindet sich das System im Zustand $|u_a\rangle$,

$$w_{a\to a}(0) = \left| \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_E |u_a(E)|^2 \, \mathrm{d}E \right|^2 = 1 .$$

Die Fläche unter der Kurve $|u_a(E)|^2$ ist eins (Normierung!). Für $t > 0$ wird nach Gl. (149) $|u_a(E)|^2$ mit der periodischen Funktion $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$ multipliziert. Bei

$$t = \frac{2\pi\hbar}{\varepsilon}$$

befindet sich eine Periode innerhalb der Breite ε. Für Zeiten $t \gtrsim 2\pi\hbar/\varepsilon$ werden sich also im Integral (149) die Beiträge ungefähr herausmitteln. Wir können daher diese Zeit größenordnungsmäßig mit der Lebensdauer τ identifizieren

$$\tau \approx \frac{2\pi\hbar}{\varepsilon} . \tag{150}$$

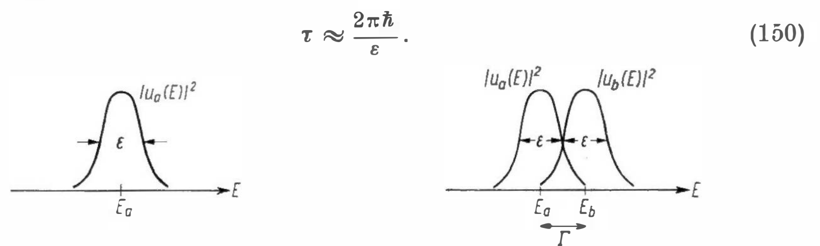


Fig. 65. Die Eigenfunktion $u_a(E)$ von $\mathscr{H}_0$ in der Gesamtenergiedarstellung

Fig. 66. Zur Definition der Linienbreite Γ

Nun betrachten wir zwei Zustände $|u_a\rangle$ und $|u_b\rangle$ und fragen nach dem Energieabstand

$$\Gamma = |E_a - E_b| , \tag{151}$$

für den die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{a\to b}$ merklich von Null verschieden ist. Diese Größe gibt also an, um welchen Betrag z. B. die Energie eines von einem Atom emittierten oder absorbierten Photons — als Folge der Elektron-Photon-Wechselwirkung — von der Bohrschen Frequenzbedingung abweichen kann (*natürliche Linienbreite*). Schieben wir in dem Ausdruck für $w_{a\to b}$ wieder Gesamtenergiezustände $|u_E\rangle$ ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} w_{a\to b}(t) &= |\langle u_a | \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}t} u_b\rangle|^2 \\ &= \left| \mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_E \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} u_a^*(E)\, u_b(E) \, \mathrm{d}E \right|^2 . \end{aligned} \tag{152}$$

Für $t = 0$ verschwindet dieser Ausdruck wegen der Orthogonalität $\langle u_a | u_b\rangle = 0$. Für $t > 0$ wird er nur dann wesentlich von Null verschieden sein, wenn sich die Funktionen $|u_a(E)|^2$ und $|u_b(E)|^2$ überlappen, was für

$$\Gamma \approx \varepsilon \tag{153}$$

eintritt (Fig. 66). Durch Vergleich mit Gl. (150) sehen wir, daß zwischen der Lebensdauer τ und der Linienbreite Γ der Zusammenhang

$$\boxed{\Gamma\tau \approx 2\pi\hbar} \tag{154}$$

besteht. *Das Produkt aus Linienbreite Γ und Lebensdauer τ ist von der Größenordnung $\hbar$.*

Sechstes Kapitel[1])

Symmetrien

§ 1. Übersicht

Die Berücksichtigung von Symmetrien, die ein bestimmtes physikalisches Problem besitzt, bringt für die theoretische Bewältigung stets erhebliche Vorteile.

Wie wir im Rahmen der klassischen Behandlung von Teilchen und Feldern (1.2 § 3 u. 1.7 § 4) sahen, haben die kontinuierlichen Symmetriegruppen Erhaltungssätze zur Folge, die man zur Definition der physikalischen Observablen verwenden kann. Auch in der Quantentheorie besteht dieser Zusammenhang zwischen *Symmetrien und Erhaltungsgrößen* ($\overset{\circ}{\mathscr{L}} = \mathscr{O}$), der aber jetzt nicht mehr auf kontinuierliche Gruppen beschränkt ist, sondern auch für Gruppen mit endlich vielen Symmetrieelementen Bedeutung erlangt.

Da die Definition der Observablen in der klassischen Physik über Erhaltungssätze erfolgt, ist es sinnvoll, für die quantentheoretische Beschreibung der Observablen gerade die Operatoren zu verwenden, auf die man durch den entsprechenden quantentheoretischen Zusammenhang zwischen Symmetrie und Erhaltungsgrößen geführt wird. Man findet auf diese Weise einen *Zugang zur Quantisierung*, auf den wir bereits in 3.2 § 1 hingewiesen haben.

Quantentheoretisch besitzen die Symmetrieüberlegungen aber noch eine weitere, vor allem für praktische Probleme wichtige Bedeutung. Man kann nämlich über die *Entartung der Eigenwerte und die Transformationseigenschaften der Eigenvektoren* eines Operators wichtige Aussagen gewinnen (§ 7).

§ 2. Darstellung von Transformationen durch unitäre Operatoren

Zunächst wollen wir uns fragen, wie eine bestimmte Transformation — z. B. eine Drehung oder Translation im Ortsraum — im unitären Raum $\mathfrak{U}$ des be-

[1]) Die in diesem Kapitel benötigten Begriffe der Gruppen und ihrer Darstellungen sind im Anhang 5.4 zusammengestellt.

trachteten physikalischen Systems zu beschreiben ist. Zur Veranschaulichung benützen wir die uns aus Kap. 3.3 bereits bekannte STERN-GERLACH-Anordnung (Fig. 67 a). Durch die Apparatur ① wird das Objekt in einen bestimmten Zustand $|\Phi\rangle$ gebracht. Über den Ausgang einer Messung mittels der Meßapparatur ② — beschrieben durch einen Operator $\mathscr{L}$ (x-Komponente des Drehimpulses) — sollen quantentheoretische Voraussagen gemacht werden.

Dreht man die *gesamte* Anordnung um einen Winkel α (Fig. 67b), so ist die relative Lage zwischen der präparierenden Apparatur ①' und der Meßapparatur ②' dieselbe wie in der Anordnung (*a*). Beschreiben wir den durch die Präparation ①' entstehenden Zustand mit $|\Phi'\rangle$ und die Meßapparatur ②' durch einen HERMITEschen Operator $\mathscr{L}'$, so müssen alle daraus ableitbaren physikalischen Aussagen über den Ausgang der Messung von $\mathscr{L}'$ dieselben sein wie in der ursprünglichen Anordnung (*a*). Es müssen also die Eigenwerte (= Meßwerte) von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{L}'$ dieselben sein und die Wahrscheinlichkeiten und Erwartungswerte

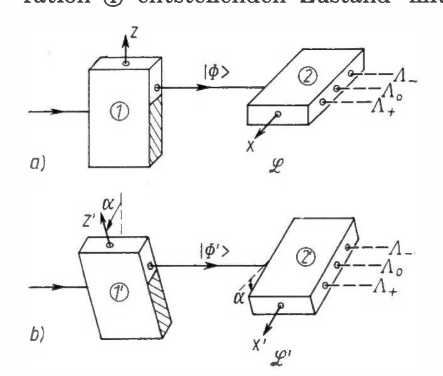


Fig. 67. Zwei STERN-GERLACH-Apparaturen. a) Durch ① Präparation von $|\Phi\rangle$, durch ② Messung von $\mathscr{L}(=\ell_x)$; b) Gemeinsame Drehung von ① *und* ② um einen Winkel α

$$|\langle u_\Lambda \mid \Phi\rangle|^2, \qquad \langle\Phi \mid \mathscr{L}\,\Phi\rangle \qquad \text{(a)}$$

mit

$$|\langle u'_\Lambda \mid \Phi'\rangle|^2, \qquad \langle\Phi' \mid \mathscr{L}'\,\Phi'\rangle \qquad \text{(b)}$$

übereinstimmen. Dies erreicht man, wenn man die ungestrichenen und gestrichenen Größen durch eine *unitäre Transformation* $\mathscr{D}(g)$ verknüpft,

$$\boxed{\mathscr{L}' = \mathscr{D}(g)\,\mathscr{L}\,\mathscr{D}^{-1}(g), \qquad |\Phi'\rangle = \mathscr{D}(g)\,|\Phi\rangle} \tag{1}$$

mit

$$\mathscr{D}^\dagger(g) = \mathscr{D}^{-1}(g)\,. \tag{2}$$

Dabei ist g ein Symbol, das eine bestimmte Transformation kennzeichnen soll (etwa in dem Beispiel die Drehung um den Winkel α). Aus 2.2 § 4a und 2.3 § 7 wissen wir nämlich, daß bei der Verknüpfung (1) die Relationen zwischen den ungestrichenen Größen in dieselben Relationen zwischen den gestrichenen Größen übergehen (also auch die Vertauschungsrelationen!) und daß die Eigenwerte von $\mathscr{L}$ und $\mathscr{L}'$ dieselben bleiben: Hat der Operator $\mathscr{L}$ zum Eigenwert Λ den Eigenvektor $|u_\Lambda\rangle$,

$$\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle\,,$$

so besitzt $\mathscr{L}'$ zum gleichen Eigenwert Λ den Eigenvektor $|\mathscr{D}(g)\,u_\Lambda\rangle = |u'_\Lambda\rangle$,

$$\mathscr{L}'\,|\mathscr{D}(g)\,u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|\mathscr{D}(g)\,u_\Lambda\rangle\,. \tag{3}$$

Wegen der Unitarität von $\mathscr{D}(g)$ ist mit $|u_\Lambda\rangle$ auch $|u'_\Lambda\rangle$ orthonormiert. Die Wahrscheinlichkeitsamplituden

$$\langle u'_\Lambda \mid \Phi'\rangle = \langle \mathscr{D}\, u_\Lambda \mid \mathscr{D}\, \Phi\rangle = \langle u_\Lambda \mid \Phi\rangle$$

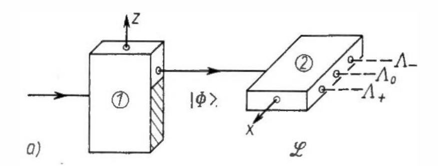
sind gegenüber der Transformation invariant. Dasselbe gilt für die Erwartungswerte

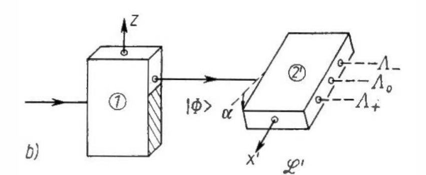
$$\langle \Phi' \mid \mathscr{L}'\, \Phi'\rangle = \langle \mathscr{D}\, \Phi \mid \mathscr{D}\, \mathscr{L}\, \mathscr{D}^{-1}\, \mathscr{D}\, \Phi\rangle = \langle \Phi \mid \mathscr{L}\, \Phi\rangle .$$

Es sei jedoch erwähnt, daß die linearen unitären Operatoren nicht die einzigen sind, mit denen man dieses Ziel erreicht.

Die gemeinsamen Transformationen von Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ und Meßapparatur $\mathscr{L}$ sind physikalisch ziemlich irrelevant. Was interessiert, sind die Aussagen über den Ausgang einer Messung, wenn man etwa *nur* die Meßapparatur ② verändert. Zum Beispiel ist in Fig. 68b die erste STERN-GERLACH-Apparatur gegenüber (*a*) unverändert geblieben, während die zweite Apparatur um einen Winkel α gedreht wurde (sie mißt die Komponente $\ell_{x'} = (\mathfrak{e}_{x'}, \vec{\ell})$ des Drehimpulses). Gegenüber der ursprünglichen Situation (*a*) wird die zweite Meßapparatur durch den Operator

$$\mathscr{L}' = \mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}\, \mathscr{D}^{-1}(g) \tag{4}$$





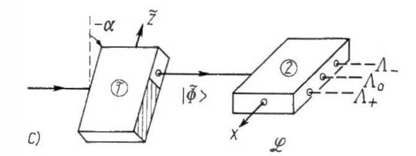


Fig. 68. a) Ursprüngliche Situation; b) HEISENBERG-Transformation c) SCHRÖDINGER-Transformation

beschrieben, während der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ unverändert bleibt („HEISENBERG-*Transformation*"). Für die Erwartungswerte der Observablen $\mathscr{L}'$ ergibt sich damit

$$\boxed{\langle \mathscr{L}'\rangle = \langle \Phi \mid \mathscr{L}'\Phi\rangle = \langle \Phi \mid \mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}\, \mathscr{D}^{-1}(g)\, \Phi\rangle}, \tag{5}$$

während die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Eigenwertes Λ von $\mathscr{L}'$ lautet

$$\boxed{w'_\Lambda = |\langle u'_\Lambda \mid \Phi\rangle|^2 = |\langle \mathscr{D}(g)\, u_\Lambda \mid \Phi\rangle|^2}. \tag{6}$$

Zu demselben Ergebnis gelangt man natürlich auch, wenn man (Fig. 68c) die präparierende Meßapparatur ① um den Winkel $-\alpha$ dreht und dafür die Meßapparatur ② unverändert läßt, weil dann die relative Lage zwischen beiden

dieselbe ist wie in Fig. 68 b. Der Zustandsvektor lautet in diesem Fall [vgl. Gl. (10)]

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \mathscr{D}^{-1}(g)\,|\Phi\rangle, \tag{7}$$

und $\mathscr{L}$ bleibt unverändert („SCHRÖDINGER-*Transformation*"). Wegen der Unitarität von $\mathscr{D}$ stimmt der Erwartungswert $\langle\tilde{\Phi}\,|\,\mathscr{L}\,\tilde{\Phi}\rangle$ mit Gl. (5) und die Wahrscheinlichkeit $|\langle u_A\,|\,\tilde{\Phi}\rangle|^2$ mit Gl. (6) überein.

§ 3. Gruppeneigenschaften der Transformationen

Wir wollen eine Reihe von Transformationen $g_1, g_2, \ldots$ betrachten — z. B. in Fig. 68 alle möglichen Drehwinkel α — und annehmen, daß diese Transformationen eine *Gruppe* $\mathfrak{G}$ bilden, d. h., daß sie die im Anhang 5.4 angegebenen Zusammensetzungseigenschaften besitzen. Diese Eigenschaften bilden sich dann auf die unitären Operatoren $\mathscr{D}(g)$ ab. Betrachten wir nämlich z. B. zwei Transformationen g_1, g_2 und die zusammengesetzte Transformation $g_2 g_1$ [1]), so gilt

$$\mathscr{L} \xrightarrow{g_1} \mathscr{L}^1 = \mathscr{D}(g_1)\,\mathscr{L}\,\mathscr{D}^{-1}(g_1),$$

$$\mathscr{L} \xrightarrow{g_2} \mathscr{L}^2 = \mathscr{D}(g_2)\,\mathscr{L}\,\mathscr{D}^{-1}(g_2),$$

$$\mathscr{L} \xrightarrow{g_2 g_1} \mathscr{L}^{21} = \mathscr{D}(g_2 g_1)\,\mathscr{L}\,\mathscr{D}^{-1}(g_2 g_1).$$

Die letzte Transformation kann man aber auch dadurch erreichen, daß man auf $\mathscr{L}^1$ die Operation g_2 anwendet,

$$\mathscr{L}^{21} = \mathscr{D}(g_2)\,\mathscr{D}(g_1)\,\mathscr{L}\,\mathscr{D}^{-1}(g_1)\,\mathscr{D}^{-1}(g_2).$$

Durch Vergleich sieht man, daß

$$\boxed{\mathscr{D}(g_2 g_1) = \eta(g_2, g_1)\,\mathscr{D}(g_2)\,\mathscr{D}(g_1)} \quad \text{mit } |\eta| = 1 \tag{8}$$

gilt. Der Einfachheit halber wollen wir im folgenden den Faktor $\eta = 1$ setzen.[2]) Durch eine entsprechende Rechnung kann man nachweisen, daß die unitären Operatoren auch die anderen Gruppeneigenschaften erfüllen: Die Einheitsoperation e, bei der nichts geschieht (identische Transformation), wird dem Einheitsoperator zugeordnet

$$\boxed{\mathscr{D}(e) = \mathbb{1}}\,. \tag{9}$$

Zur Operation g^{-1}, die g rückgängig macht, gehört dann

$$\boxed{\mathscr{D}(g^{-1}) = \mathscr{D}^{-1}(g) = \mathscr{D}^{\dagger}(g)}\,. \tag{10}$$

[1]) Unter $g_2 g_1$ verstehen wir die Transformation, bei der zuerst g_1 und dann g_2 ausgeführt wird. Das „Produkt" $g_2 g_1$ ist von rechts nach links zu lesen.

[2]) Bei der Darstellung von räumlichen Drehungen im unitären Raum mit halbzahligem Drehimpuls (5.4 § 7) ist es jedoch wichtig, daß man $\eta(g_2, g_1) = \pm 1$ setzen kann. Außerdem vgl. S. 242.

Ebenso genügen die Operatoren $\mathscr{D}(g)$ dem Assoziativgesetz. Die unitären Operatoren $\mathscr{D}(g)$ erfüllen also die Gruppenaxiome, sie bilden eine „*Darstellung der Gruppe im unitären Raum*".

Beispiel: Bei der *Rauminversion* i ersetzt man die Koordinaten x_k durch $-x_k$. Zusammen mit der identischen Transformation $e\,(x_k \to x_k)$ ergibt sich eine Gruppe, die aus zwei Elementen besteht. Wendet man die Inversion zweimal hintereinander an, so erhält man wieder die identische Transformation e. Dafür schreiben wir formal (vgl. Anhang 5.4 § 2)

$$i^2 = e. \tag{11}$$

Für die zugeordneten unitären Operatoren $\mathscr{D}(i)$ und $\mathscr{D}(e) = 1$ gilt daher, daß das Quadrat des Operators $\mathscr{D}(i)$ der Einheitsoperator wird,

$$\mathscr{D}^2(i) = 1. \tag{12}$$

In diesem Fall ist also

$$\mathscr{D}(i) = \mathscr{D}^{-1}(i) = \mathscr{D}^\dagger(i), \tag{13}$$

d. h., der Operator $\mathscr{D}(i)$ ist HERMITEsch und unitär. Seine Eigenwerte, die *Parität*, sind $+1$ oder -1.

Weil die Komponenten eines beliebigen, polaren Vektors bei einer Inversion ihr Vorzeichen verändern, gilt z. B. für die Komponenten des Orts- und Impulsvektors

$$\begin{aligned} \mathscr{D}(i)\, x_k\, \mathscr{D}(i) &= -\, x_k, \\ \mathscr{D}(i)\, p_k\, \mathscr{D}(i) &= -\, p_k. \end{aligned} \tag{14}$$

Für den Drehimpuls $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$, der als axialer Vektor (antimetrischer Tensor) bei der Inversion sein Vorzeichen nicht verändert, hat man jedoch

$$\mathscr{D}(i)\, \ell_k\, \mathscr{D}(i) = +\, \ell_k. \tag{15}$$

Dasselbe gilt auch für den Spin (4.3 § 4).

Aufg. 76: Man zeige, daß

a) $\mathscr{D}(i) = e^{\frac{i\pi}{2\hbar}\left(\alpha \vec{x}^2 + \frac{1}{\alpha}\vec{p}^2 - 3\hbar 1\right)}$ der *Inversionsoperator*,

b) $\mathscr{D}(a) = e^{-\frac{ia}{2\hbar}(\vec{p}\vec{x} + \vec{x}\vec{p})}$ der *Dehnungsoperator*

ist.

§ 4. Symmetrie und Erhaltungsgrößen

Ebenso wie in der klassischen Theorie (1.2 § 3 und 1.7 § 4) wollen wir jetzt untersuchen, wann die quantentheoretischen Bewegungsgleichungen invariant sind gegenüber bestimmten Transformationen (*Forminvarianz der Bewegungsgleichungen*). Dazu führen wir etwa im SCHRÖDINGER-Bild (3.5 § 6) in der Bewe-

gungsgleichung für den Zustandsvektor

$$\frac{\mathrm{d}\,|\Phi^S\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{H}^S\,|\Phi^S\rangle$$

unitäre SCHRÖDINGER-Transformationen (7)

$$|\Phi^S\rangle = \mathscr{D}^S(g)\,|\tilde{\Phi}^S\rangle$$

mit

$$\mathscr{D}^S(g) = \mathscr{D}(g;\, x^S,\, p^S,\, t)$$

aus,

$$\left(\frac{\partial \mathscr{D}^S(g)}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} |\tilde{\Phi}^S\rangle + \mathscr{D}^S(g)\,\frac{\mathrm{d}\,|\tilde{\Phi}^S\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{H}^S\,\mathscr{D}^S(g)\,|\tilde{\Phi}^S\rangle,$$

und fragen, wann der transformierte Zustandsvektor $|\tilde{\Phi}^S\rangle$ wieder die Bewegungsgleichung

$$\frac{\mathrm{d}\,|\tilde{\Phi}^S\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{H}^S\,|\tilde{\Phi}^S\rangle$$

(mit demselben $\mathscr{H}^S$!) erfüllt. Dies ist offenbar dann der Fall, wenn die unitären Operatoren $\mathscr{D}(g)$ der Gleichung

$$\boxed{\mathring{\mathscr{D}}(g) \equiv \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H},\, \mathscr{D}(g)] + \left(\frac{\partial \mathscr{D}(g)}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathcal{O}} \tag{16}$$

genügen. Diese *Bedingungsgleichung für die Forminvarianz der quantentheoretischen Bewegungsgleichungen* ist bildunabhängig.

Für den Spezialfall, daß $\mathscr{D}$ nicht explizit zeitabhängig ist, bedeutet diese Gleichung einfach die Vertauschbarkeit von $\mathscr{H}$ mit allen Transformationen $\mathscr{D}(g)$,

$$[\mathscr{H},\, \mathscr{D}(g)] = \mathcal{O}, \tag{17}$$

d. h., der transformierte HAMILTON-Operator $\mathscr{H}'$ muß mit $\mathscr{H}$ identisch sein [vgl. Gl. (4)],

$$\boxed{\mathscr{H}' = \mathscr{D}(g)\,\mathscr{H}\,\mathscr{D}^{-1}(g) = \mathscr{H}}\,.\text{[1][2]} \tag{17a}$$

Alle Transformationen $\mathscr{D}(g)$, für die $\mathscr{H}'$ mit $\mathscr{H}$ identisch ist, nennt man die *Symmetriegruppe* $\mathfrak{G}$ von $\mathscr{H}$.

Nun bilden wir aus den unitären Operatoren $\mathscr{D}$ durch

$$\mathscr{L}_+ = \frac{1}{2}\,(\mathscr{D} + \mathscr{D}^\dagger) \quad \text{oder} \quad \mathscr{L}_- = \frac{1}{2\mathrm{i}}\,(\mathscr{D} - \mathscr{D}^\dagger) \tag{18}$$

[1]) Die Beschreibung einer solchen Symmetrie in der Ortsdarstellung von $\mathscr{H}$ findet sich in Aufg. 92.

[2]) Die Tatsache, daß die Invarianz von $\mathscr{H}$ eine stärkere Forderung ist als jene der Bewegungsgleichungen, ist uns schon aus der klassischen Behandlung (vgl. S. 39) bekannt.

HERMITEsche Operatoren $\mathscr{L}$. Falls $\mathscr{D}$ unitär und HERMITEsch ist [wie z. B. der Paritätsoperator (13)], so ist $\mathscr{L}_+$ mit $\mathscr{D}$ identisch. Haben wir andererseits Symmetrieoperatoren

$$\mathscr{D}(g) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} g \mathscr{L}} \qquad (g = \text{kontinuierlich, reell, } \mathscr{L} = \text{HERMITEsch})$$

einer kontinuierlichen Gruppe (5.4 § 2) vorliegen, so gehört zur infinitesimalen Transformation δg der Operator

$$\mathscr{D}(\delta g) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \delta g \cdot \mathscr{L}.$$

$\mathscr{L}_-(\delta q)$ ist daher proportional zu $\mathscr{L}$.

Die auf diese Weise aus $\mathscr{D}$ abgeleiteten HERMITEschen Operatoren $\mathscr{L}$ haben nach Gl. (16) die Eigenschaft

$$\boxed{\overset{\circ}{\mathscr{L}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [\mathscr{H}, \mathscr{L}] + \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathscr{O}}, \tag{19}$$

d. h., *die durch die Symmetrietransformationen $\mathscr{D}(g)$ definierten* HERMITE*schen Operatoren $\mathscr{L}$ sind Erhaltungsgrößen für das betrachtete Problem.* Bei explizit zeitunabhängigem $\mathscr{L}$ vertauscht $\mathscr{L}$ mit $\mathscr{H}$.

Ist der HAMILTON-Operator etwa invariant gegen Rauminversion,

$$[\mathscr{H}, \mathscr{D}(i)] = \mathscr{O},$$

— ein Beispiel dafür ist ein Teilchen in einem Potential $\mathscr{V}(r)$, das nur vom Abstand r abhängt, $\mathscr{H} = \frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2} + \mathscr{V}(r)$, — so gilt $\overset{\circ}{\mathscr{D}}(i) = \mathscr{O}$, die Parität ist dann also eine Erhaltungsgröße.

Andererseits zeigen etwa die Experimente des β-Zerfalls, daß zu ihrer Beschreibung ein HAMILTON-Operator $\mathscr{H}_{sW}$ nötig ist, der nicht invariant gegen Rauminversionen ist,

$$[\mathscr{H}_{sW}, \mathscr{D}(i)] \neq \mathscr{O}.$$

In diesem Fall der „schwachen Wechselwirkungen" $\mathscr{H}_{sW}$ ist also $\overset{\circ}{\mathscr{D}}(i) \neq \mathscr{O}$ (*Nichterhaltung der Parität*).

Den Zusammenhang zwischen Symmetrietransformationen und Erhaltungsgrößen kann man wieder wie in der klassischen Theorie (1.2 § 3b u. 1.7 § 4b) dazu benutzen, um zu einer *Definition der physikalischen Observablen* zu gelangen. *Die klassisch und quantentheoretisch aus derselben Symmetrietransformation resultierende Observable bezeichnen wir mit demselben Namen. Die Struktur der Symmetriegruppe führt*, wie wir in den folgenden Paragraphen sehen werden, *auf die Vertauschungsrelationen der zugehörigen Operatoren. Über den Zusammenhang zwischen Symmetrie und Erhaltungsgrößen gelangen wir damit zur Quantisierung.*

Aufg. 77: a) Man zeige, daß der Operator

$$\mathscr{D}(v) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} v(m x - t p)}$$

eine GALILEI-Transformation darstellt. Man untersuche die Forminvarianz der kräftefreien Bewegungsgleichung gegen GALILEI-Transformation.
b) Wie lautet der quantentheoretische Schwerpunktsatz für ein N-Teilchenproblem?

§ 5. Translationen, Definition des Impulsoperators, Vertauschungsrelationen zwischen Ort und Impuls

Der eben erwähnte Sachverhalt möge am Beispiel der kontinuierlichen Ortstranslationen erläutert werden. Zur Vereinfachung der Überlegung beschränken wir uns auf den eindimensionalen Fall. Führt man zuerst eine Translation um eine Strecke ξ_1 und dann eine Translation um die Strecke ξ_2 aus, so ist das Ergebnis unabhängig von der Reihenfolge [die Translationen bilden eine ABELsche Gruppe (vgl. Anhang 5.4 § 2)]. Es herrscht dieselbe Situation wie nach einer Translation um die Strecke $\xi_1 + \xi_2$. Daher gilt für die Translationsoperatoren, die wir mit $\mathscr{T}(\xi)$ (ξ = irgendeine reelle Zahl) bezeichnen, (wenn wir versuchen, in Gl. (8) mit $\eta = 1$ auszukommen),

$$\mathscr{T}(\xi_1)\,\mathscr{T}(\xi_2) = \mathscr{T}(\xi_2)\,\mathscr{T}(\xi_1) = \mathscr{T}(\xi_1 + \xi_2). \tag{20}$$

Die verschiedenen Translationsoperatoren sind also miteinander vertauschbar. Zur Lösung dieser Funktionalgleichung für $\mathscr{T}(\xi)$ differenzieren wir die Gl. (20) einmal nach dem Parameter ξ_1,

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{T}(\xi_1)}{\mathrm{d}\xi_1}\,\mathscr{T}(\xi_2) = \frac{\mathrm{d}\mathscr{T}(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\,\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}\xi_1} = \frac{\mathrm{d}\mathscr{T}}{\mathrm{d}\xi}, \qquad (\xi = \xi_1 + \xi_2)$$

und dann nach ξ_2,

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{T}(\xi_2)}{\mathrm{d}\xi_2}\,\mathscr{T}(\xi_1) = \frac{\mathrm{d}\mathscr{T}}{\mathrm{d}\xi}.$$

Durch Vergleich erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{T}(\xi_1)}{\mathrm{d}\xi_1}\,\mathscr{T}^{-1}(\xi_1) = \frac{\mathrm{d}\mathscr{T}(\xi_2)}{\mathrm{d}\xi_2}\,\mathscr{T}^{-1}(\xi_2) = \mathscr{G}.$$

Da nach der ersten Gleichung eine Funktion von ξ_1 gleich einer Funktion von ξ_2 sein soll, muß der Operator $\mathscr{G}$ von ξ_1 und ξ_2 unabhängig sein. Nach Integration ergibt sich[1])

$$\mathscr{T}(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\mathscr{G}}.$$

Damit $\mathscr{T}$ unitär ist, muß $\mathscr{G} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\mathscr{p}$ sein. Dabei ist $\mathscr{p}$ ein HERMITEscher Operator, von dem wir feststellen werden, daß er gerade der Impulsoperator ist (der Faktor $\hbar^{-1}$ ist dann aus Dimensionsgründen nötig). Damit lautet

---

[1]) Weil $\mathscr{T}(\xi = 0) = \mathbf{1}$ sein muß.

der *Operator für die Translation um eine Strecke* ξ

$$\boxed{\mathcal{T}(\xi) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\xi \not p}}\,.\,[1] \tag{21}$$

Für eine infinitesimale Translation $\delta\xi$ ergibt sich

$$\mathcal{T}(\delta\xi) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\xi\cdot \not p, \tag{22}$$

d. h.

$$\not p = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\mathrm{d}\mathcal{T}}{\mathrm{d}\xi}\right)_{\xi=0}. \tag{22a}$$

Transformieren wir den Ortsoperator x mit dem Translationsoperator $\mathcal{T}(\xi)$, so erhalten wir einen Operator x', der sich definitionsgemäß von x um $-\xi\, 1$ unterscheidet,

$$\mathcal{T}(\xi)\, x\, \mathcal{T}^{-1}(\xi) = x' = x - \xi\, 1\,. \tag{23}$$

Setzen wir die infinitesimale Translation (22) ein,

$$\left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\xi\cdot \not p\right) x \left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\xi\cdot \not p\right) = x - \delta\xi\cdot 1\,,$$

so erhalten wir in erster Ordnung von $\delta\xi$

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\not p, x]\,\delta\xi = \delta\xi\, 1\,. \tag{24}$$

Damit besteht zwischen dem Operator $\not p$, der die infinitesimale Translation beschreibt, und dem Ortsoperator die Vertauschungsrelation

$$\boxed{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\not p, x] = 1}\,. \tag{25}$$

Es bleibt noch zu zeigen, daß $\not p$ tatsächlich der *Impuls* ist. Zu diesem Zweck betrachten wir einen HAMILTON-Operator $\mathcal{H}$ eines translationsinvarianten Problems. Für ihn gilt nach Gl. (17)

$$[\mathcal{H}, \mathcal{T}(\xi)] = 0\,. \tag{26}$$

Hieraus folgt

$$[\mathcal{H}, \not p] = 0$$

oder

$$\mathring{\not p} = 0\,,$$

d. h., der Operator $\not p$ ist bei einem translationsinvarianten Problem eine Erhaltungsgröße. *Dieses Ergebnis berechtigt uns in der Tat, $\not p$ als den Operator zu interpretieren, der der Observablen Impuls zugeordnet ist. Gleichzeitig ist damit ge-*

[1]) Eine analoge Überlegung bezüglich der Gruppe der Zeittranslationen führt auf

$$\mathcal{U}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}t\mathcal{H}}\,.$$

Weil die Energieerhaltung mit der Invarianz gegen Zeittranslationen verknüpft ist [Gl. (1.2–42)], ist $\mathcal{H}$ als HAMILTON-Operator zu interpretieren. $\mathcal{U}$ ist der die Dynamik beschreibende unitäre Operator [Gl. (3.5–38)].

zeigt, daß zwischen Orts- und Impulsoperator die Vertauschungsrelation (25) *besteht.*

In einem homogenen Magnetfeld $\mathfrak{B}_0$ herrscht ebenfalls Translationsinvarianz, weil die Kraft nur von der Geschwindigkeit, nicht aber vom Ort des Teilchens abhängt. Wie die Gleichungen (3.2–31 u. 41) zeigen, ist dann aber nicht $\vec{p}$, sondern $\vec{p} + \frac{q}{c}\mathfrak{A}_0(\vec{x}) = m\vec{v} + \frac{2q}{c}\mathfrak{A}_0(\vec{x})$ eine Erhaltungsgröße. Hieraus ersieht man, daß in diesem Fall der zugehörige Translationsoperator nicht die einfache Gestalt (21) hat, sondern

$$\mathscr{T}(\vec{\xi}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{\xi}(\vec{p} + \frac{q}{c}\mathfrak{A}_0(\vec{x}))}, \qquad \mathfrak{A}_0(\vec{x}) = \frac{1}{2}(\mathfrak{B}_0 \times \vec{x})$$

lautet.[1]) Nach Gl. (2.2–16) ergibt sich hieraus

$$\mathscr{T}(\vec{\xi}_1)\,\mathscr{T}(\vec{\xi}_2) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}q}{2\hbar c}(\vec{\xi}_1 \times \vec{\xi}_2)\mathfrak{B}_0}\,\mathscr{T}(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2),$$

d. h., es liegt eine „Darstellung bis auf einen Faktor" der Translationsgruppe vor [Gl. (8)]. Ferner überzeugt man sich leicht, daß $\mathscr{T}(\vec{\xi})$ die Eigenschaft

$$\mathscr{T}(\vec{\xi})\,\vec{x}\,\mathscr{T}^{-1}(\vec{\xi}) = \vec{x} - \vec{\xi}\,\mathbf{1},$$

$$\mathscr{T}(\vec{\xi})\,\vec{v}\,\mathscr{T}^{-1}(\vec{\xi}) = \vec{v}$$

($\vec{v}$ = Geschwindigkeitsoperator) hat, die jeder Translationsoperator besitzen muß.

Aufg. 78: Man beweise die Vertauschungsrelationen $[p_i, p_k] = \mathcal{O}$, $[x_i, x_k] = \mathcal{O}$ und $\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p_i, x_k] = \delta_{ik}\mathbf{1}$.

§ 6. Drehungen

a) Drehoperatoren und Drehimpuls

Die Raumdrehung um eine feste Achse, als die wir die x_3-Achse wählen, bilden ebenso wie die Translationen eine Abelsche Gruppe $O(2)$. Wir können daher das Ergebnis der vorangehenden Paragraphen übernehmen und für den *unitären Operator* $\mathscr{R}_3(\alpha)$ *einer Drehung um den Winkel* α schreiben

$$\boxed{\mathscr{R}_3(\alpha) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\mathscr{J}_3}}. \tag{27}$$

Für eine infinitesimale Drehung $\delta\alpha$ ergibt sich

$$\mathscr{R}_3(\delta\alpha) = \mathbf{1} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\cdot\mathscr{J}_3, \tag{28}$$

d. h., der Hermitesche Operator $\mathscr{J}_3$ ist

$$\mathscr{J}_3 = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\mathrm{d}\mathscr{R}_3(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right)_{\alpha=0}. \tag{29}$$

---

[1]) Dem entspricht in der klassischen Behandlung 1.2 § 3 eine Funktion $\Omega = -\frac{q}{c}\vec{\xi}\,\mathfrak{A}_0$.

Ist der HAMILTON-Operator *invariant* gegenüber Drehung um die x_3-Achse,

$$\boxed{[\mathscr{H}, \mathscr{R}_3(\alpha)] = \mathcal{O}}, \tag{30}$$

so gilt auch

$$[\mathscr{H}, \mathscr{J}_3] = \mathcal{O}, \tag{31}$$

d. h.

$$\mathring{\mathscr{J}}_3 = \mathcal{O}.$$

Der HERMITEsche Operator $\mathscr{J}_3$ ist als Folge der Drehinvarianz um die x_3-Achse eine Erhaltungsgröße. *$\mathscr{J}_3$ ist also der Operator der Komponente des Drehimpulses in 3-Richtung.* Ist $\mathring{\mathscr{J}}_3 = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [\mathscr{H}, \mathscr{J}_3] \neq \mathcal{O}$, so wirkt ein mechanisches Moment $\mathscr{M}_3$.

Weil keine Richtung im Raum ausgezeichnet ist, gilt die Beziehung (27) für jede Drehachse. Charakterisieren wir diese durch einen Einheitsvektor $\mathfrak{e}$, so erhalten wir in Verallgemeinerung von Gl. (27) für den Operator $\mathscr{R}_\mathfrak{e}(\alpha)$, der eine Drehung α um diese Richtung beschreibt,

$$\boxed{\mathscr{R}_\mathfrak{e}(\alpha) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha(\mathfrak{e}\vec{\mathscr{J}})}}. \tag{32}$$

$(\mathfrak{e}\vec{\mathscr{J}})$ ist die Komponente des Drehimpulses $\vec{\mathscr{J}}$ in Richtung von $\mathfrak{e}$,

$$(\mathfrak{e}\vec{\mathscr{J}}) = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\mathrm{d}\mathscr{R}_\mathfrak{e}(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha}\right)_{\alpha=0}. \tag{33}$$

Wie schon die Anschauung zeigt, sind Drehungen um verschiedene Achsen *nicht* miteinander vertauschbar, die Gruppe $O(3)$ aller Raumdrehungen ist nicht ABELsch. Aus diesem Grund können auch die Drehimpulskomponenten in verschiedenen Richtungen (= infinitesimale Drehungen um diese Richtung) nicht miteinander vertauschbar sein.

Eine beliebige Drehung im Raum läßt sich bekanntlich durch eine Drehung γ um die x_3-Achse, dann eine Drehung β um die (alte) x_2-Achse und schließlich durch eine Drehung α um die (alte) x_3-Achse darstellen [α, β, γ = EULERsche Winkel, Gl. (5.4—18)]. Man kann daher den Operator einer beliebigen Drehung in der Form

$$\mathscr{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\mathscr{J}_3}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta\mathscr{J}_2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma\mathscr{J}_3} \tag{34}$$

schreiben.

b) Drehimpuls-Vertauschungsrelationen

Die Einheitsvektoren $\mathfrak{e}_1'$, $\mathfrak{e}_2'$, $\mathfrak{e}_3'$ eines um die x_3-Achse gedrehten Koordinatensystems (Fig. 69) stehen mit den ursprünglichen Einheitsvektoren $\mathfrak{e}_1$, $\mathfrak{e}_2$, $\mathfrak{e}_3$ in dem Zusammenhang

$$\begin{aligned} \mathfrak{e}_1' &= +\mathfrak{e}_1\cos\alpha + \mathfrak{e}_2\sin\alpha, \\ \mathfrak{e}_2' &= -\mathfrak{e}_1\sin\alpha + \mathfrak{e}_2\cos\alpha, \\ \mathfrak{e}_3' &= \mathfrak{e}_3, \end{aligned} \tag{35}$$

so daß zwischen den Komponenten v_k und v'_k irgendeines Vektors

$$\vec{v} = \sum v_k \, \mathrm{e}_k = \sum v'_k \, \mathrm{e}'_k$$

die Beziehungen

$$\begin{aligned} v'_1 &= + v_1 \cos\alpha + v_2 \sin\alpha, \\ v'_2 &= - v_1 \sin\alpha + v_2 \cos\alpha, \\ v'_3 &= v_3 \end{aligned} \tag{36}$$

bestehen.

Fig. 69. Drehung des Koordinatensystems um einen Winkel α

Andererseits erhält man die Operatoren v'_k, indem man die v_k mit dem Drehoperator $\mathcal{R}_3(\alpha)$ transformiert,

$$\boxed{\mathcal{R}_3 \, v_k \, \mathcal{R}_3^{-1} = v'_k} \, . \tag{37}$$

Führen wir insbesondere eine infinitesimale Drehung $\delta\alpha$ um die x_3-Achse aus ($\cos\alpha \approx 1$, $\sin\alpha \approx \delta\alpha$), so ergibt sich aus Gl. (28)

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) v_1 \left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) &= + v_1 + v_2\,\delta\alpha, \\ \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) v_2 \left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) &= - v_1\,\delta\alpha + v_2, \\ \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) v_3 \left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,\delta\alpha\,\mathcal{J}_3\right) &= v_3 \end{aligned} \tag{38}$$

oder

$$\boxed{\begin{array}{l} [\mathcal{J}_3, v_1] = - \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\, v_2, \quad [\mathcal{J}_3, v_2] = + \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\, v_1, \quad [\mathcal{J}_3, v_3] = \mathcal{O} \\ \quad \vdots \end{array}} \, . \tag{39}$$

Weil keine Achse im Raum ausgezeichnet ist, erhält man entsprechende Gleichungen für die übrigen Komponenten durch zyklische Vertauschung der Indizes. *Jeder Vektoroperator $\vec{v}$ muß also die Vertauschungsrelationen* (39) *mit den Drehimpulskomponenten erfüllen.*

Identifiziert man $\vec{v}$ insbesondere mit $\vec{\mathcal{J}}$ selbst, so ergeben sich für die Drehimpulskomponenten die Vertauschungsrelationen

$$\boxed{[\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_1] = - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathcal{J}_2, \qquad [\mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3] = - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathcal{J}_1, \qquad [\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2] = - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathcal{J}_3} \, . \tag{40}$$

Diese Relationen haben wir in (3.2 § 3 c) für Systeme, deren Observable reine Funktionen von x_i und p_i sind, aus der Definition des Bahndrehimpulses $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$ direkt abgeleitet. Ersetzen wir in Gl. (39) $\vec{v}$ durch $\vec{x}$ bzw. $\vec{p}$, so erkennen wir die Beziehungen (3.2–22) wieder.

Die Vertauschungsrelationen (40) gelten jedoch generell *für jeden Drehimpuls*, also z. B. auch für den inneren Drehimpuls (Spin) der Elementarteilchen und den Gesamtdrehimpuls, der sich additiv aus mehreren Einzeldrehimpulsen zusammensetzt. Hierauf kommen wir in Kap. 4.3 zurück.

Aufg. 79: Gegeben seien zwei Richtungen $\mathfrak{e}$ und $\mathfrak{e}'$. Man berechne die Vertauschungsrelationen zwischen den Projektionen $(\mathfrak{e}\,\vec{\mathscr{J}})$ und $(\mathfrak{e}'\,\vec{v})$ des Drehimpulses $\vec{\mathscr{J}}$ und eines beliebigen Vektors $\vec{v}$.

§ 7. Symmetrie und Entartung[1])

a) Symmetrietransformationen von Eigenvektoren

Der HAMILTON-Operator sei invariant gegenüber einer Gruppe $\mathfrak{G}$ von Transformationen g, d. h. $\mathscr{H}$ vertauscht mit allen Symmetrieoperatoren $\mathscr{D}(g)$,

$$[\mathscr{H}, \mathscr{D}(g)] = \mathscr{O}. \tag{41}$$

Wir betrachten das Eigenwertproblem

$$\mathscr{H}\,|u_a^\mu\rangle = E_a\,|u_a^\mu\rangle. \tag{42}$$

Ist der Eigenwert E_a gerade t_a-fach ($\mu = 1, \ldots, t_a$), so spannen die unabhängigen Eigenvektoren

$$|u_a^1\rangle, \ldots, |u_a^{t_a}\rangle$$

den zugehörigen Eigenraum $\mathfrak{u}_a$ auf: Jede Linearkombination dieser Vektoren ist ebenfalls Eigenvektor zum Eigenwert E_a. Wegen der Vertauschbarkeit von $\mathscr{H}$ mit allen Symmetrieoperatoren $\mathscr{D}(g)$ sind auch alle Vektoren

$$|\mathscr{D}(g)\,u_a^1\rangle, \ldots, |\mathscr{D}(g)\,u_a^{t_a}\rangle$$

Eigenvektoren zum Eigenwert E_a (vgl. 2.3 § 5). Diese müssen also Linearkombinationen der $|u_a^\mu\rangle$ (bei festem a) sein,

$$\boxed{|\mathscr{D}(g)\,u_a^\mu\rangle = \sum_{\mu'=1}^{t_a} |u_a^{\mu'}\rangle\, D_a^{\mu'\mu}(g)}\,. \tag{43}$$

Durch diese Gleichungen wird das Transformationsverhalten der Eigenvektoren $|u_a^\mu\rangle$ *gegenüber Symmetrietransformationen gekennzeichnet.* Die Koeffizienten $D_a^{\mu'\mu}(g)$ sind die Matrixelemente der Symmetrieoperatoren $\mathscr{D}(g)$, gebildet in der Energiedarstellung,

$$D_a^{\mu'\mu}(g) = \langle u_a^{\mu'}\,|\,\mathscr{D}(g)\,u_a^\mu\rangle. \tag{44}$$

Weil die Operatoren $\mathscr{D}(g)$ alle Gruppenrelationen erfüllen (§ 3), gilt dies auch für die Matrizen (44). Sie bilden eine *t_a-dimensionale Darstellung Γ* von $\mathfrak{G}$ (vgl.

[1]) Dieser und der nächste Paragraph können beim ersten Studium überschlagen werden. Sie setzen die Kenntnis der Darstellungstheorie von Gruppen (5.4 § 3 bis § 7) voraus.

Anhang 5.4 § 3), *der Eigenraum* $\mathfrak{u}_a$ *ist ein Darstellungsraum der Symmetriegruppe. Die Dimension der Darstellung ist gleich der Vielfachheit des Energieeigenwertes* E_a. Weil in einem Eigenraum $\mathfrak{u}_a$ noch unitäre Transformationen der Eigenvektoren $|u_a^\mu\rangle$ möglich sind (2.3 § 5), sind die Darstellungsmatrizen nur bis auf unitäre Transformationen festgelegt („äquivalente Darstellungsmatrizen"). *Zu jedem Eigenwert* E_a *gehört* (bis auf Äquivalenz) *eine* t_a*-dimensionale Darstellung* Γ *der Symmetriegruppe* $\mathfrak{G}$ von $\mathscr{H}$. Weil alle zueinander äquivalenten Darstellungen durch ein Charakterensystem der Gruppe $\mathfrak{G}$ eindeutig gekennzeichnet sind (vgl. Anhang 5.4 § 5), spielen die Zahlen χ des Charakterensystems die Rolle von Quantenzahlen.

b) Klassifikation der Eigenwerte nach irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe

Der HAMILTON-Operator sei in stetiger Weise von einem Parameter ε abhängig, $\mathscr{H} = \mathscr{H}(\varepsilon)$. Wir wollen zunächst annehmen, daß bei der Veränderung von ε sich die Symmetriegruppe des HAMILTON-Operators *nicht* verändert.

Ist für $\varepsilon = 0$ *die Darstellung* $\Gamma_a(0)$ *von* $E_a(0)$ *irreduzibel* (5.4 § 4), *so spaltet für* $\varepsilon \neq 0$ *der Energieterm nicht auf. Die Darstellung* $\Gamma_a(\varepsilon)$ *von* $E_a(\varepsilon)$ *ist (i. allg.) dieselbe wie* $\Gamma_a(0)$.

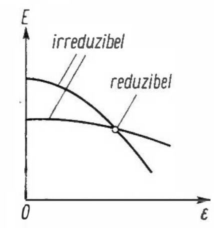


Fig. 70. Terme mit irreduzibler Darstellung spalten nicht auf. „Zufälliges" Entstehen von reduziblen Darstellungen

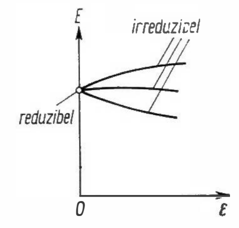


Fig. 71. Aufspaltung eines Terms mit reduzibler Darstellung in Terme mit irreduzibler Darstellung

Beweis: Würde der Term etwa in zwei Terme $E_b(0)$ und $E_c(\varepsilon)$ aufspalten, so hätte $\Gamma_b(\varepsilon)$ eine geringere Dimension als $\Gamma_a(0)$. Weil aber $\Gamma_a(0)$ irreduzibel ist, kann $\Gamma_b(\varepsilon)$ nicht in $\Gamma_a(0)$ enthalten sein, d. h., der Eigenraum $\mathfrak{u}_b(\varepsilon)$ müßte orthogonal zum Eigenraum $\mathfrak{u}_a(0)$ sein. Ein solcher Übergang ist aber bei stetiger Veränderung von $\mathscr{H}$ nicht möglich, d. h., der Term kann nicht aufspalten. Außerdem muß aber auch $\Gamma_a(0) = \Gamma_a(\varepsilon)$ sein, weil andernfalls die zugehörigen Darstellungsräume orthogonal wären. Bei stetiger Veränderung von $\mathscr{H}$ ist ein solcher Übergang aber unmöglich. — Lediglich in dem Fall, daß sich bei Veränderung von ε „zufällig" zwei Terme überschneiden, liegt im Schnittpunkt eine reduzible Darstellung vor (Fig. 70).

Ist für $\varepsilon = 0$ *die Darstellung* $\Gamma_a(0)$ *reduzibel, so kann für* $\varepsilon \neq 0$ *der Term in ebenso viele Terme aufspalten wie die reduzible Darstellung irreduzible Bestandteile enthält* (Fig. 71). Energieterme, die zu reduziblen Darstellungen gehören, sind also instabil, Terme, die zu irreduziblen Darstellungen gehören, hingegen stabil

gegen Veränderungen des HAMILTON-Operators bei gleicher Symmetrie. Sieht man also von „zufälligen" Entartungen ab (die nur bei bestimmten Werten von ε auftreten), so *kann man die Energieeigenwerte nach den irreduziblen Darstellungen der Symmetriegruppe des* HAMILTON-*Operators klassifizieren.* Die Quantenzahlen sind das irreduzible Charakterensystem. Natürlich gibt es i. allg. mehr Eigenwerte, als es irreduzible Darstellungen der Gruppe gibt. Es gibt verschiedene Energieterme mit derselben irreduziblen Darstellung.

1. Beispiel: Der HAMILTON-Operator sei invariant gegen *Rauminversion.* Die Inversionsgruppe $I = (e, i)$ besitzt (5.4 § 4) nur zwei irreduzible Darstellungen Γ_1 und Γ_2 mit den Charakteren

I	e	i
Γ_1	1	1
Γ_2	1	−1

Die Energieterme gehören dann entweder zu Eigenvektoren der irreduziblen Darstellung Γ_1 (Parität + 1) oder der irreduziblen Darstellung Γ_2 (Parität − 1).[1] Nach Gl. (43) gilt also das Transformationsverhalten der Eigenvektoren

$$|\mathscr{D}(i)\, u_1\rangle = +\, |u_1\rangle, \quad |\mathscr{D}(i)\, u_2\rangle = -\, |u_2\rangle. \tag{45}$$

2. Beispiel: Der HAMILTON-Operator habe die Dieder-Symmetrie D_3 (vgl. Anhang Kap. 5.4). Solche Punktsymmetrien treten z. B. für ein Ion in Salzen der Übergangselemente auf: Die Nachbarionen bewirken ein elektrostatisches Feld bestimmter Symmetrie. Im Fall D_3 gibt es Energieterme, die zu den irreduziblen Darstellungen Γ_1, Γ_2 und Γ_3 gehören. Die beiden ersten sind eindimensional, die zugehörigen Terme sind nicht entartet. Γ_3 hingegen ist eine zweidimensionale Darstellung, der zugehörige Energieterm ist zweifach.

3. Beispiel: Der HAMILTON-Operator sei invariant gegenüber allen Drehungen der dreidimensionalen Drehgruppe $O(3)$. Er vertauscht also mit allen Komponenten $\mathscr{J}_k$ des gesamten Drehimpulses,

$$[\mathscr{H}, \mathscr{J}_k] = \mathscr{O}. \tag{46}$$

Dieser Fall liegt z. B. für die Gesamtheit aller Elektronen in einem Atom vor, weil der HAMILTON-Operator — der sich aus der kinetischen Energie, dem Potential des Kernes, der COULOMBschen Wechselwirkung zwischen den Elektronen[2]) und einer Spin-Bahn-Kopplung zusammensetzt — kugelsymmetrisch

[1]) Sind außer der Inversion noch weitere Symmetrietransformationen vorhanden, so kann der Energieterm entsprechend diesen Symmetrien entartet sein. Seine Eigenvektoren transformieren sich nach den Darstellungen der gesamten Symmetriegruppe.

[2]) Die COULOMBsche Wechselwirkung $\frac{q^2}{r^{12}} = \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|}$ ist gegenüber irgendeiner gemeinsamen Drehung von $\vec{x}^1$ und $\vec{x}^2$ invariant.

ist. Die Energieterme E_{aJ} gehören dann i. allg. zu einer $(2J + 1)$-dimensionalen irreduziblen Darstellung Γ_J von $O(3)$ (vgl. 5.4 § 7) oder, physikalisch gesprochen, die Energieeigenvektoren $|u_{aJ}^M\rangle$ $(M = J, \ldots -J)$ sind gleichzeitig Eigenvektoren zum Gesamtdrehimpuls (vgl. Kap. 4.3 u. Aufg. 110). Sie transformieren sich bei Drehungen nach den Drehmatrizen $R_J^{M'M}(\mathfrak{e}, \alpha)$ [Gl. (5.4–48)].

c) Systemzusammensetzung

Wir gehen von zwei, zunächst unabhängigen Systemen (1) und (2) aus, deren HAMILTON-Operatoren $\mathscr{H}^1$ und $\mathscr{H}^2$ dieselbe Symmetriegruppe $\mathfrak{G}$ besitzen mögen. Die Eigenwerte E_a^1 und E_b^2 gehören dann i. allg. zu irreduziblen Darstellungen Γ_a und Γ_b von $\mathfrak{G}$, d. h., die zugehörigen Eigenvektoren $|u_a^{\mu 1}\rangle$ und $|u_b^{\nu 2}\rangle$ transformieren sich bei Anwendung der Symmetrieoperatoren $\mathscr{D}(g)$ nach den Darstellungsmatrizen $D_a^{\mu'\mu}(g)$ und $D_b^{\nu'\nu}(g)$. Die Eigenvektoren von $\mathscr{H}^1 + \mathscr{H}^2$ zum Eigenwert $E_a^1 + E_b^2$ sind die Produktvektoren $|u_a^{\mu 1}\rangle\,|u_b^{\nu 2}\rangle$, die sich nach der i. allg. *reduziblen Produktdarstellung* $\Gamma_a \times \Gamma_b$ von $\mathfrak{G}$ transformieren (5.4 § 6). Schaltet man nun eine Wechselwirkung $\mathscr{H}^{12}$ zwischen den beiden Teilsystemen ein, die ebenfalls die Symmetriegruppe $\mathfrak{G}$ besitzen möge, so wird nach dem in b) Gesagten der ungestörte Energieterm $E_a^1 + E_b^2$ in ebenso viele Terme E_Γ aufspalten wie $\Gamma_a \times \Gamma_b$ irreduzible Darstellungen Γ von $\mathfrak{G}$ enthält.

Beispiel: Wir betrachten die *Zusammensetzung zweier kugelsymmetrischer Systeme.* Wir können dabei z. B. an zwei Elektronen im gemeinsamen Potential eines Kerns denken, denen als $\mathscr{H}^{12}$ die kugelsymmetrische COULOMB-Wechselwirkung hinzugefügt wird. Die zur Energie $E_{J_1} + E_{J_2}$ ohne Wechselwirkung gehörigen Produktzustände transformieren sich nach der reduziblen Darstellung $\Gamma_{J_1} \times \Gamma_{J_2}$ von $O(3)$. Die Ausreduktion von $\Gamma_{J_1} \times \Gamma_{J_2}$ in die irreduziblen Darstellungen Γ_J von $O(3)$ ist durch die CLEBSCH-GORDAN-Beziehung (5.4–55) gegeben. Danach lauten die einzig möglichen J-Werte des zusammengesetzten Systems

$$\boxed{J = J_1 + J_2,\ J_1 + J_2 - 1, \ldots, |J_1 - J_2|}\,. \tag{47}$$

(*Quantenmechanisches Additionsgesetz von Drehimpulsen*, vgl. dazu 4.3 § 7). Ein Energieterm $E_{J_1} + E_{J_2}$ kann daher unter dem Einfluß einer kugelsymmetrischen Wechselwirkung in die Terme

$$E_{J_1+J_2},\quad E_{J_1+J_2-1}, \ldots, E_{|J_1-J_2|} \tag{48}$$

aufspalten, deren Eigenvektoren sich bei Raumdrehungen nach den irreduziblen Darstellungen

$$\Gamma_{J_1+J_2},\quad \Gamma_{J_1+J_2-1}, \ldots, \Gamma_{|J_1-J_2|}$$

von $O(3)$ transformieren (vgl. Aufg. 110).

d) Termaufspaltung durch Symmetrieverminderung

Durch Einschalten einer Störung kann die Symmetrie des Hamilton-Operators verringert werden: Die Symmetriegruppe $\mathfrak{G}(\varepsilon)$, die zu $\mathscr{H}(\varepsilon)$ gehört, umfaßt weniger Symmetrieelemente als die zu $\mathscr{H}(0)$ gehörige Symmetriegruppe $\mathfrak{G}(0)$, $\mathfrak{G}(\varepsilon)$ ist eine Untergruppe von $\mathfrak{G}(0)$ (5.4 § 2).

Für $\varepsilon = 0$ liege ein Term vor, der irreduzibel bezüglich der Gruppe $\mathfrak{G}(0)$ ist. Derselbe Term kann bezüglich der Untergruppe $\mathfrak{G}(\varepsilon)$ jedoch reduzibel sein, d. h., *er kann unter dem Einfluß der Störung in ebenso viele Terme aufspalten wie die reduzible Darstellung irreduzible Bestandteile (bezüglich* $\mathfrak{G}(\varepsilon)$*) enthält* (Fig. 72).

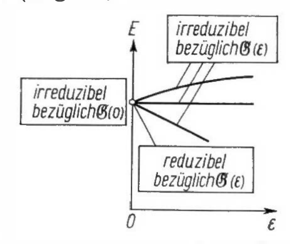


Fig. 72. Termaufspaltung durch Symmetrieverminderung $\mathfrak{G}(0) \to \mathfrak{G}(\varepsilon)$

Fig. 73. Symmetrieverminderung $D_3 \to C_3$ durch ein äußeres Magnetfeld (Zeeman-Effekt)

Beispiel: Der ungestörte Hamilton-Operator habe die Punktsymmetrie D_3. Nun werde ein Magnetfeld in Richtung der 3-Achse angelegt. Damit reduziert sich die Symmetrie auf die Gruppe C_3 (vgl. Aufg. 80). Nach der im Anhang angegebenen Methode der Ausreduktion [Gl. (5.4–41)] erhält man die in Fig. 73 angegebene Aufspaltung (Zeeman-Effekt) in die eindimensionalen Darstellungen $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ der Gruppe C_3.

Aufg. 80: Ein Teilchen in einem kugelsymmetrischen Potential werde
a) in ein homogenes elektrisches Feld (Stark-Effekt),
b) in ein homogenes magnetisches Feld (Zeeman-Effekt) gebracht. Welche räumlichen Symmetrien verbleiben? Welche Vielfachheit haben die Energieterme?

§ 8. Auswahlregeln

Das Transformationsverhalten der Eigenvektoren bietet eine große Hilfe für die Berechnung von Matrixelementen. Ganz besonders einfach gestaltet sich damit die Feststellung des Verschwindens von Matrixelementen („Auswahlregeln").

Wir wollen einen Satz von Operatoren $\mathscr{L}_k^\varrho$ betrachten, der sich nach einer irreduziblen Darstellung Γ_k einer Gruppe transformiert, d. h., es soll gelten

$$\boxed{\mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}_k^\varrho\, \mathscr{D}^{-1}(g) = \sum_{\varrho'} \mathscr{L}_k^{\varrho'}\, D_k^{\varrho'\varrho}(g)}\,, \tag{49}$$

wobei die Koeffizienten $D_k^{\varrho'\varrho}(g)$, die zur Darstellung Γ_k gehörigen Darstellungsmatrizen sind.

Beispiele aus der Drehgruppe $O(3)$: Die zur identischen Darstellung $\Gamma_{J=0}$ gehörigen Operatoren $\mathscr{L}_0$ sind die *Skalare*, $O(3)$ ist Symmetriegruppe von $\mathscr{L}_0$ [Gl. (17a)]. Die Operatoren $\mathscr{L}_1^\varrho$ $(\varrho = 1, 0, -1)$, die sich nach der Darstellung $\Gamma_{J=1}$ transformieren, sind Komponenten eines *Vektors* [Gl. (37)]. Die Operatoren $\mathscr{L}_2^\varrho$ $(\varrho = 2, 1, 0, -1, -2)$, die sich nach $\Gamma_{J=2}$ transformieren, sind die Komponenten eines *symmetrischen Tensors mit Spur Null* (5 unabhängige Komponenten). Allgemein nennt man einen Satz von $2J+1$ Operatoren $\mathscr{L}_J^\varrho$ $(\varrho = J, \ldots, -J)$, der zur irreduziblen Darstellung Γ_J von $O(3)$ gehört, *irreduzible Tensoroperatoren* oder *Multipoloperatoren* der Stufe J. —

Die Vektoren $|u_a^\mu\rangle$ und $|u_b^\nu\rangle$, mit denen die Matrixelemente

$$\langle u_a^\mu \mid \mathscr{L}_k^\varrho\, u_b^\nu\rangle$$

gebildet werden, sollen zu irreduziblen Darstellungen Γ_a und Γ_b von $\mathfrak{G}$ gehören,

$$\left.\begin{aligned} |\mathscr{D}(g)\, u_a^\mu\rangle &= \sum_{\mu'} |u_a^{\mu'}\rangle\, D_a^{\mu'\mu}(g), \\ |\mathscr{D}(g)\, u_b^\nu\rangle &= \sum_{\nu'} |u_b^{\nu'}\rangle\, D_b^{\nu'\nu}(g). \end{aligned}\right\} \tag{50}$$

Der Vektor $|\mathscr{L}_k^\varrho u_b^\nu\rangle$ transformiert sich damit nach der Produktdarstellung $\Gamma_k \times \Gamma_b$, denn es gilt

$$\begin{aligned} |\mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}_k^\varrho\, u_b^\nu\rangle &= \mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}_k^\varrho\, \mathscr{D}^{-1}(g) \mid \mathscr{D}(g)\, u_b^\nu\rangle \\ &= \sum_{\varrho'\nu'} \mid \mathscr{L}_k^{\varrho'}\, u_b^{\nu'}\rangle\, D_k^{\varrho'\varrho}(g)\, D_b^{\nu'\nu}(g). \end{aligned}$$

Die Matrixelemente

$$\langle u_a^\mu \mid \mathscr{L}_k^\varrho\, u_b^\nu\rangle = \langle \mathscr{D}(g)\, u_a^\mu \mid \mathscr{D}(g)\, \mathscr{L}_k^\varrho\, u_b^\nu\rangle$$

sind daher sicher dann *Null*, wenn bei der Ausreduktion von

$$\Gamma_k \times \Gamma_b = \cdots + q_a\, \Gamma_a + \cdots \tag{51}$$

die Darstellung Γ_a *nicht* vorkommt $(q_a = 0)$, weil dann die Vektoren $|u_a^\mu\rangle$ und $|\mathscr{L}_k^\varrho u_b^\nu\rangle$ in verschiedenen, aufeinander senkrechten Darstellungsräumen liegen. Es ist also

$$\boxed{\langle u_a^\mu \mid \mathscr{L}_k^\varrho\, u_b^\nu\rangle = 0, \quad \text{falls} \quad q_a = 0}\,. \tag{52}$$

1. Beispiel: Drehgruppe. Es mögen die verschwindenden Matrixelemente irgendeines Vektoroperators $\vec{v}$, gebildet mit Darstellungsvektoren von $O(3)$ (Drehimpulseigenvektoren)

$$\langle u_{J'}^{M'} \mid \vec{v}\; u_J^M\rangle$$

aufgesucht werden. Wegen

$$\Gamma_1 \times \Gamma_J = \Gamma_{J+1} + \Gamma_J + \Gamma_{J-1}, \qquad (J \neq 0)$$

sind alle Matrixelemente *Null*, für die *nicht*

$$\boxed{\Delta J \equiv J' - J = 0, \pm 1} \tag{53}$$

gilt. Außerdem verschwinden die Matrixelemente mit $J = J' = 0$, weil $\Gamma_1 \times \Gamma_0 = \Gamma_1$ ist.

2. Beispiel: Inversionsgruppe. Der Ortsoperator $\vec{x}$ gehört, ebenso wie der Impulsoperator $\vec{p}$ nach Gl. (14) zur Darstellung Γ_2 von I. Daher sind alle Matrixelemente von $\vec{x}$ zwischen Zuständen gleicher Parität [Gl. (45)] Null (LAPORTE*sche Regel*),

$$\langle u_1 \mid \vec{x}\, u_1 \rangle = \langle u_2 \mid \vec{x}\, u_2 \rangle = 0 .\ ^{1)} \tag{54}$$

Die Operatoren des Drehimpulses und des magnetischen Moments hingegen gehören als axiale Vektoren (antimetrische Tensoren) zur identischen Darstellung Γ_1 von I [Gl. (15)]. Daher verschwinden alle Matrixelemente des magnetischen Moments zwischen Zuständen verschiedener Parität,

$$\langle u_1 \mid \vec{m}\, u_2 \rangle = 0 . \tag{55}$$

(Vgl. auch Aufg. 102.)

Die Matrixelemente von $\vec{x}$ und $\vec{m}$ bestimmen die Übergangswahrscheinlichkeiten (3.5 § 8) eines Atoms im elektromagnetischen Strahlungsfeld („elektrische und magnetische Dipolstrahlung"). Die Auswahlregeln legen damit jene Spektrallinien fest, die überhaupt auftreten können.

Siebentes Kapitel

Quantentheorie bei unvollständiger Information über den Zustand des Systems

§ 1. Die Phasenraumdichte der klassischen statistischen Mechanik

In der klassischen Mechanik wird der Zustand eines Systems durch die Angabe der Orts- und Impulskoordinaten $x_1, \ldots, p_1, \ldots$ beschrieben, die einen Punkt im *Phasenraum* darstellen. Bei vielen Problemen sind jedoch diese Werte keineswegs exakt bekannt, z. B. weiß man von einem makroskopischen Körper nicht alle 10^{23} Koordinaten, sondern nur einige wenige Größen, die eine Funktion dieser sind. Man kann in solchen Fällen bloß sagen, daß in bestimmten Bereichen des Phasenraumes sich das System nicht (oder kaum) befinden wird, während es in anderen Bereichen mit großer Wahrscheinlichkeit vorkommt. Man drückt also

[1]) In der Ortsdarstellung bedeuten diese Gleichungen nichts anderes, als daß ein Integral über eine ungerade Funktion verschwindet.

die *Information*, die man über das System (zu einem bestimmten Zeitpunkt) hat, durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$\varrho = \varrho(x_1, \ldots, p_1, \ldots) \tag{1}$$

im Phasenraum aus (Fig. 74). Sie ist die *Wahrscheinlichkeitsdichte* dafür, daß sich das System in einem Phasenpunkt $x_1, \ldots, p_1, \ldots$ befindet (klassische statistische Mechanik). Man normiert ϱ, indem man das Integral über den ganzen Phasenraum eins setzt,

$$\int \varrho \, \mathrm{d}\Omega = 1 \quad (\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}p_1 \ldots). \tag{2}$$

Weiß man von einem System z. B. auf Grund der Ungenauigkeit der Meßapparatur, daß es sich in einem bestimmten Phasenbereich befindet, kann aber nicht sagen, welcher Phasenpunkt innerhalb dieses Bereiches realisiert ist, so wählt man entsprechend dieser Kenntnis über das System die Verteilung

$$\varrho = \begin{cases} \text{const} & \text{innerhalb des Bereiches} \\ 0 & \text{außerhalb des Bereiches}. \end{cases} \tag{3}$$

Fig. 74. Phasenraumdichte $\varrho(x, p)$

Für die Bereiche, innerhalb denen man keine Aussagen hat, nimmt man also Gleichverteilung an. Ist z. B. allein der Wert E_0 der Energie genau bekannt, so hat man die sogenannte mikrokanonische Verteilung

$$\varrho = A\,\delta(E - E_0). \tag{4}$$

Da man außer der Energie nichts weiß, sind alle Punkte auf der Energieschale $E(x_1, \ldots, p_1, \ldots) = E_0$ gleich wahrscheinlich, sie besitzen dasselbe ϱ.

Ist die Verteilung insbesondere durch

$$\varrho = \delta(x_1 - x_1^0) \ldots \delta(p_1 - p_1^0) \ldots \tag{5}$$

gegeben, so gelangt man zur klassischen Mechanik zurück, denn dann weiß man, daß sich das System mit Sicherheit im Punkt $x_1^0, \ldots, p_1^0, \ldots$ befindet. Dies nennt man den *reinen* Fall, alle wesentlich statistischen ϱ hingegen ein *Gemisch*. Die Identität

$$\varrho(x_1, \ldots, p_1, \ldots) = \int \varrho(x_1^0, \ldots, p_1^0, \ldots)\,\delta(x_1 - x_1^0) \ldots \delta(p_1 - p_1^0) \ldots \mathrm{d}\Omega^0$$

zeigt, daß das Gemisch der Mittelwert reiner Verteilungen (5), gebildet mit den Gewichten $\varrho(x_1^0, \ldots, p_1^0, \ldots)$ ist.

Bei vorgegebener Wahrscheinlichkeitsverteilung ϱ berechnet sich der Erwartungswert $\langle L \rangle$ einer klassischen Observablen $L = L(x_1, \ldots, p_1, \ldots)$ nach

$$\langle L \rangle = \int L\,\varrho\,\mathrm{d}\Omega. \tag{6}$$

Für viele Observable erhält man damit Werte $\langle L \rangle$, die mit dem am realen System gemessenen Wert von L nicht übereinstimmen, weil das gewählte ϱ nicht genügend Information zur Vorhersage der Meßwerte dieser Observablen enthält. Für alle Observable hingegen, deren Schwankung ΔL klein gegen die

Ungenauigkeit δL der Meßapparatur ist,

$$\Delta L = \sqrt{\langle (L - \langle L \rangle)^2 \rangle} \ll \delta L, \tag{7}$$

läßt Gl. (6) Vorhersagen zu, die am realen System eintreffen. (Vgl. Aufg. 81.)

§ 2. Quantentheorie eines Gemisches

Die im Kap. 3.3 gegebenen Aussagen über den Ausgang einer Messung hängen wesentlich davon ab, daß man unmittelbar vor einer Messung den Zustand $|\Phi\rangle$ des Systems kennt. Man muß daher irgendwann einmal bereits an dem System eine nicht entartete Größe gemessen und dadurch den Zustandsvektor im unitären Raum fixiert haben (für spätere Zeiten ist er dann durch die SCHRÖDINGER-Gleichung gegeben). Bei einem makroskopischen System, bestehend aus vielen Teilchen (z. B. einem Atomstrahl oder einem Festkörper), kann man eine solche Messung realiter überhaupt nicht durchführen. Es würde bedeuten, daß man z. B. 10^{23} Ortskoordinaten und z-Komponenten des Spins messen müßte! Praktisch mißt man an einem solchen System immer hochgradig entartete Größen, wie z. B. die Gesamtenergie, den Druck oder die Magnetisierung. Nach der Messung einer solchen Größe $\mathscr{L}$ liegt nach Gl. (3.3-34) $|\Phi'\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_A$. Da man die Richtung von $|\Phi'\rangle$ in diesem Raum dadurch erhält, daß man den vor der Messung vorliegenden Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ auf diesen Eigenraum projiziert, ergibt eine solche Messung keine Information über die Richtung *in* $\mathfrak{u}_A$, wenn man $|\Phi\rangle$ vor der Messung nicht kannte. Je größer die Entartung der gemessenen Größe ist (= Dimension des Eigenraumes $\mathfrak{u}_A$), um so weniger Information liefert deren Messung über den Zustand des Systems. Man muß also — wie in der klassischen statistischen Mechanik — auf sehr viele Information über das System verzichten, obwohl nach den Gesetzen der Quantentheorie eine wesentlich höhere Information möglich wäre.[1])

Für die Vorhersage von Experimenten an einem so schwach präparierten System muß man über die Wahrscheinlichkeitsaussagen der Quantentheorie noch eine Statistik stülpen, die der mangelnden Information Rechnung trägt, welche man über das System besitzt. Die Wahrscheinlichkeiten, die durch diese zweite Statistik hereinkommen, sind also von derselben Natur wie in der klassischen Mechanik (§ 1) und sind wohl zu unterscheiden von jenen, die die Quantentheorie liefert, weil letztere auch prinzipiell nicht durch eine genauere Messung überwunden werden können.

Das Ziel der folgenden Überlegung ist, neben der quantentheoretisch unumgänglichen Wahrscheinlichkeit zusätzlich noch die Statistik einzuführen, die durch mangelnde Information (d. h. durch nichtvollständige Messung) bedingt

[1]) Die Messung einer nicht entarteten Größe hingegen bedeutet, daß man die quantentheoretisch maximale Information gewonnen hat.

ist. Diese Formulierung der Quantentheorie eines Gemisches steht also in Analogie zur klassischen statistischen Mechanik:

Reiner Zustand		*Gemisch*
Klassische Physik	→	Klassische stat. Physik
↓		↓
Quantentheorie des reinen Zustandes	→	Quantentheorie eines Gemisches

a) Das Gemisch als inkohärente Überlagerung reiner Zustände

Ähnlich wie in der klassischen Mechanik (§ 1) geht man in der Quantentheorie vor, wenn man über das System nicht genügend Information besitzt, um sagen zu können, welche Richtung sein Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ in dem unitären Raum $\mathfrak{U}$ einnimmt. Man betrachtet daher in $\mathfrak{U}$ eine Reihe von möglichen Zustandsvektoren

$$|\Phi^1\rangle, |\Phi^2\rangle, \ldots, |\Phi^\alpha\rangle, \ldots \tag{8}$$

und beschreibt durch Zahlen

$$p^1, \quad p^2, \quad \ldots, \quad p^\alpha, \quad \ldots \tag{9}$$

die *Wahrscheinlichkeiten dafür, daß das System in einem der Zustände* $|\Phi^1\rangle$, $|\Phi^2\rangle, \ldots, |\Phi^\alpha\rangle, \ldots$ *vorliegt.* Von den möglichen Zustandsvektoren $|\Phi^\alpha\rangle$ in diesem statistischen Gemisch wollen wir nur verlangen, daß sie alle auf eins normiert sind,

$$\langle\Phi^\alpha|\Phi^\alpha\rangle = 1, \tag{10}$$

ihre Orthogonalität hingegen werden wir im allgemeinen nicht voraussetzen,

$$\langle\Phi^\alpha \mid \Phi^{\alpha'}\rangle \neq 0.$$

Die Zahlen p^α, die wir die „*Gewichte*" des Gemisches nennen, sollen der Normierungsbedingung

$$\sum_\alpha p^\alpha = 1 \quad \text{mit} \quad 0 \leqq p^\alpha \leqq 1 \tag{11}$$

genügen. (Die folgenden Überlegungen lassen sich auch auf den Fall übertragen, daß α kontinuierlich ist. Wir wollen der Einfachheit halber jedoch die Beziehungen nur für diskrete α-Werte formulieren.)

Was ergibt sich im Fall eines Gemisches für den *Erwartungswert* $\langle\mathscr{L}\rangle$ einer Observablen $\mathscr{L}$? Nach den statistischen Aussagen der Quantentheorie ist der Erwartungswert im Zustand $|\Phi^\alpha\rangle$ gegeben durch

$$\langle\mathscr{L}\rangle^\alpha = \langle\Phi^\alpha|\, \mathscr{L}\, \Phi^\alpha\rangle. \tag{12}$$

Diese Ergebnisse sind nun bei Vorliegen eines Gemisches mit den Gewichten p^α zu mitteln, so daß man insgesamt für den Erwartungswert der Observablen $\mathscr{L}$

erhält [vgl. Gl. (3.3-24)]

$$\boxed{\langle \mathscr{L} \rangle = \sum_\alpha p^\alpha \langle \mathscr{L} \rangle^\alpha = \sum_\alpha p^\alpha \langle \Phi^\alpha | \mathscr{L} \Phi^\alpha \rangle = \sum_\alpha p^\alpha \operatorname{Sp}(\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle} \mathscr{L})}. \tag{13}$$

Dabei ist zu beachten, daß man die Mittelung über das Gemisch in den Erwartungswerten $\langle \mathscr{L} \rangle^\alpha$ ausführt und nicht in den Zuständen $|\Phi^\alpha\rangle$. *Das Gemisch ist also eine inkohärente Überlagerung reiner Zustände, die verschiedenen $|\Phi^\alpha\rangle$ interferieren untereinander nicht.* Entwickelt man die $|\Phi^\alpha\rangle$ nach einem Basissystem $|v_k\rangle$ des unitären Raumes,

$$|\Phi^\alpha\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \, \Phi^\alpha(k) \, \mathrm{d}k \quad \text{mit} \quad \Phi^\alpha(k) = \langle v_k | \Phi^\alpha \rangle, \tag{14}$$

so erhält man

$$\langle \mathscr{L} \rangle = \sum_\alpha \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk'} p^\alpha \, \Phi^\alpha(k) \, \Phi^{\alpha *}(k') \, L(k',k) \, \mathrm{d}k \, \mathrm{d}k' . \tag{15}$$

In dieser Formel kommt noch einmal deutlich der Unterschied zwischen den beiden Arten der Erwartungswertbildungen zum Ausdruck: Die quantenmechanische geschieht mittels der Wahrscheinlichkeitsamplituden und führt zu Interferenztermen, die Mittelung über das Gemisch hingegen erfolgt durch die Gewichte p^α und ergibt keine Interferenz.

b) Der statistische Operator

Um die beiden verschiedenen Mittelungsprozesse in ein gemeinsames Kleid zu bringen, führt man den Hermiteschen Operator

$$\boxed{\rho = \sum_\alpha p^\alpha \mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle} = \sum_\alpha p^\alpha |\Phi^\alpha\rangle \langle \Phi^\alpha|} \tag{16}$$

ein, den man den *statistischen Operator des Gemisches* nennt[1]). Bildet man in irgendeiner Basis $|v_k\rangle$ des unitären Raumes seine Matrixelemente, so erhält man

$$\varrho(k, k') = \sum_\alpha p^\alpha \, \Phi^\alpha(k) \, \Phi^{\alpha *}(k'). \tag{17}$$

Diese Matrix heißt *statistische Matrix* oder auch *Dichtematrix* (in Anlehnung an die Phasenraumdichte der statistischen Mechanik). Ihre Diagonalelemente

$$\varrho(k, k) = \sum_\alpha p^\alpha \, |\Phi^\alpha(k)|^2$$

sind positiv.

---

[1]) Durch die Vektoren $|\Phi^\alpha\rangle$ und die zugehörigen Gewichte p^α ist der statistische Operator ρ eindeutig bestimmt. Umgekehrt kann man aber ein vorgegebenes ρ aus verschiedenen $|\Phi^\alpha\rangle$ und p^α aufbauen.

Im Fall eines reinen Zustandes (ein $p = 1$, alle anderen $= 0$) geht natürlich ρ in den Projektionsoperator auf den einen Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ über,

$$\rho_{\text{rein}} = \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}, \tag{18}$$

man kehrt zur Quantentheorie des reinen Zustandes zurück.

Die Definition (16) des statistischen Operators erlaubt es, den Erwartungswert (13) in der einfachen Form

$$\boxed{\langle \mathscr{L} \rangle = \mathrm{Sp}(\rho\, \mathscr{L})} \tag{19}$$

zu schreiben. Für die Wahrscheinlichkeit w_Λ des Eintretens eines Meßwertes Λ, die der Erwartungswert des Projektionsoperators $\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda}$ auf den Eigenraum $\mathfrak{u}_\Lambda$ ist [Gl. (3.3–39)], erhält man daher im Fall eines Gemisches

$$\boxed{w_\Lambda = \langle \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda} \rangle = \mathrm{Sp}\left(\rho\, \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda}\right)}\,. \tag{20}$$

Da die Summe aller Wahrscheinlichkeiten eins sein muß und andererseits $\mathop{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda} \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_\Lambda}\, \mathrm{d}\Lambda = 1$ ist, erhalten wir als Normierungsbedingung von ρ

$$\mathrm{Sp}\, \varrho = 1. \tag{21}$$

In den Matrixelementen bedeutet dies

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k} \varrho\,(k, k)\, \mathrm{d}k = 1\,.$$

Weil alle $\rho\,(k, k)$ positiv sind, können sie somit nicht größer als eins werden,

$$0 \leqq \varrho\,(k, k) \leqq 1. \tag{22}$$

Berechnet man die Spur der Gl. (20) insbesondere mit den Eigenvektoren $|u_\Lambda^\mu\rangle$ der zu messenden Größe $\mathscr{L}$, so erhält man[1])

$$w_\Lambda = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\mu} \langle u_\Lambda^\mu \mid \rho\, u_\Lambda^\mu \rangle\, \mathrm{d}\mu, \tag{23}$$

d. h., *die Diagonalelemente des statistischen Operators in der $\mathscr{L}$-Darstellung liefern die Wahrscheinlichkeiten für einen Meßwert Λ.* Mit der Definitionsgleichung (16) kann man dafür auch schreiben

$$w_\Lambda = \sum_\alpha p^\alpha \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\mu} |\langle u_\Lambda^\mu \mid \Phi^\alpha \rangle|^2\, \mathrm{d}\mu = \sum_\alpha p^\alpha w_\Lambda^\alpha, \tag{24}$$

d. h., die quantentheoretischen Wahrscheinlichkeiten w_Λ^α werden mit den Gewichten p^α des Gemisches gemittelt. Für die Summe über alle Λ ergibt sich

---

[1]) Wegen der Orthogonalität $\langle u_\Lambda^\mu \mid u_{\Lambda'}^{\mu'} \rangle = \delta(\Lambda, \Lambda')\, \delta(\mu, \mu')$ der Eigenvektoren ist

$$w_\Lambda = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda', \mu', \mu} \langle u_{\Lambda'}^{\mu'} \mid \rho\, u_\Lambda^\mu \rangle \langle u_\Lambda^\mu \mid u_{\Lambda'}^{\mu'} \rangle\, \mathrm{d}\Lambda'\, \mathrm{d}\mu'\, \mathrm{d}\mu = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\mu} \langle u_\Lambda^\mu \mid \rho\, u_\Lambda^\mu \rangle\, \mathrm{d}\mu.$$

natürlich bei Berücksichtigung von Gl. (10) und (11)

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_{\Lambda} w_{\Lambda}\, \mathrm{d}\Lambda = \sum_{\alpha} p^{\alpha} \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\Lambda} w^{\alpha}_{\Lambda}\, \mathrm{d}\Lambda = \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1 . \tag{25}$$

Sind insbesondere die Vektoren $|\Phi^{\alpha}\rangle$ orthogonal, so ist Gl. (16) die Spektraldarstellung des statistischen Operators. In diesem Fall sind die Gewichte p^{α} die Eigenwerte r von ρ (sind die $|\Phi^{\alpha}\rangle$ nicht vollständig, so hat ρ außerdem noch Eigenwerte Null). Für sie gilt also

$$0 \leqq r \leqq 1, \quad \sum r = 1 . \tag{26}$$

Die Spur des Operators ρ^2 ist die Summe über alle r^2. Daraus folgt

$$\mathrm{Sp}\, \rho^2 = \sum r^2 \leqq (\sum r)^2 = (\mathrm{Sp}\, \rho)^2 = 1 \tag{27}$$

d. h.,

$$\mathrm{Sp}\, \rho^2 = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k,k'} \varrho\, |(k, k')|^2\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k' \leqq 1 . \tag{28}$$

c) Spezielle statistische Operatoren

Welchen speziellen statistischen Operator ρ man für die Beschreibung eines physikalischen Systems zugrunde legt, hängt wie in der klassischen statistischen Mechanik von der Kenntnis ab, die man über das System hat.

Ist die Vorgeschichte des betrachteten physikalischen Systems *völlig unbekannt*, so hat man den statistischen Operator

$$\rho = \frac{\mathbf{1}}{\mathrm{Sp}\, \mathbf{1}} \tag{29}$$

anzusetzen. Berechnet man mit diesem die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten irgendeines Meßwertes Λ, so erhält man

$$w_{\Lambda} = \mathrm{Sp}\left(\rho\, \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda}}\right) = \frac{\mathrm{Sp}\, \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda}}}{\mathrm{Sp}\, \mathbf{1}} = \frac{t_{\Lambda}}{\mathrm{Sp}\, \mathbf{1}} ,$$

(t_{Λ} = Dimension von $\mathfrak{u}_{\Lambda}$). w_{Λ} ist proportional der Vielfachheit des Eigenwertes, aber sonst *un*abhängig vom Meßwert Λ.

Eine solch totale Unkenntnis über den Zustand des Systems vor einer Messung, wie es Gl. (29) ausdrückt, liegt bei praktischen Experimenten natürlich nie vor. Man weiß z. B., daß ein Teilchen aus einer vorgegebenen Quelle (z. B. Reaktor) stammt und in einem begrenzten Raumgebiet sich mit einer Geschwindigkeit im Intervall $v \ldots v + \mathrm{d}v$ bewegt. Eine solche *Präparation* vermittelt eine Kenntnis über das System, die den statistischen Operator wesentlich besser als Gl. (29) festlegt (vgl. § 3). Ist z. B. von einem System mit kontinuierlichen Energieeigenwerten E bekannt, daß ein bestimmter Energiewert E_0 vorliegt, so liegt — in Analogie zu Gl. (4) — der „*mikrokanonische*" statistische Operator

$$\rho = \frac{\delta(\mathscr{H} - E_0 \mathbf{1})}{\mathrm{Sp}\, \delta(\mathscr{H} - E_0 \mathbf{1})} \tag{30}$$

vor [zur Begründung vgl. Gl. (40)].

Für ein System im thermischen Gleichgewicht, das durch eine *Temperatur* T beschrieben wird, ergibt sich — analog zur klassischen statistischen Thermodynamik — der „*kanonische*" statistische Operator

$$\boxed{\rho = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\operatorname{Sp} e^{-\beta\mathcal{H}}}}, \qquad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right) \tag{31}$$

(k = BOLTZMANN-Konstante).

Im Rahmen der Informationstheorie läßt sich zeigen (E. T. JAYNES), daß die Größe

$$\eta = -k \operatorname{Sp}(\rho \ln \rho)$$

ein Maß für die fehlende Information über den Zustand des Systems ist. Entsprechend dem Prinzip der vorurteilsfreien Schätzung ist sie unter den Nebenbedingungen, die die vorhandene Information über das System beinhalten, möglichst groß zu machen. Ist die innere Energie U des Systems bekannt, so identifiziert man diese mit dem Erwartungswert des HAMILTON-Operators,

$$\langle\mathcal{H}\rangle = \operatorname{Sp}(\rho\,\mathcal{H}) = U,$$

gebildet mit dem zu bestimmenden statistischen Operator ρ. Eine weitere Nebenbedingung, die das gesuchte ρ auf alle Fälle erfüllen muß, ist die Gl. (21). Multiplizieren wir diese mit einem LAGRANGE-Parameter α und die Beziehung für $\langle\mathcal{H}\rangle$ mit β, so lautet die Extremalisierungsbedingung

$$\delta(\operatorname{Sp}\rho\ln\rho + \alpha \operatorname{Sp}\rho + \beta \operatorname{Sp}\rho\,\mathcal{H}) = 0$$

oder

$$\operatorname{Sp}[(\ln\rho + (1+\alpha)\,1 + \beta\,\mathcal{H})\,\delta\rho] = 0.$$

Weil $\delta\rho$ eine beliebige Variation ist, ergibt sich hieraus

$$\rho = e^{-(1+\alpha)1-\beta\mathcal{H}},$$

so daß man wegen Gl. (21) auf den kanonischen statistischen Operator (31) geführt wird.[1])

Die mit dem extremalen ρ berechnete Größe η nennt man die *Entropie* S des Systems (die also bezogen ist auf die vorliegende Information über das System). Hieraus folgt, daß $\beta = 1/kT$ ist.

---

[1]) Kennt man neben der Energie noch weitere Erwartungswerte des physikalischen Systems, so ist das eben angegebene Verfahren mit mehreren LAGRANGE-Parametern durchzuführen. Ist z. B. der Erwartungswert des Teilchenzahloperators $\mathcal{N}$ (Kap. 4.5),

$$\langle\mathcal{N}\rangle = \operatorname{Sp}(\rho\,\mathcal{N}),$$

bekannt, so gelangt man zum sogenannten *großkanonischen statistischen Operator*

$$\rho_g = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}+\nu\mathcal{N}}}{\operatorname{Sp} e^{-\beta\mathcal{H}+\nu\mathcal{N}}}. \tag{31$_g$}$$

Aus der damit gebildeten großkanonischen Entropie S_g folgt, daß $\zeta = kT\nu$ das chemische Potential pro Teilchen ist.

Schreibt man den kanonischen statistischen Operator (31) in der Spektraldarstellung von $\mathscr{H}$,

$$\rho = \frac{\sum\!\!\!\!\int_E e^{-\beta E} \mathscr{P}_{u_E} dE}{\sum\!\!\!\!\int_E e^{-\beta E} t_E \, dE},$$

(t_E = Vielfachheit von E), so sieht man, daß man im thermischen Gleichgewicht bei der Bildung von Erwartungswerten so tun kann, *als ob* das System mit der Wahrscheinlichkeit $e^{-\beta E}$ im Energiezustand vorläge[1]). Dies ist der Grund dafür, daß die Energieeigenzustände auch dann besonders wichtig sind, wenn man gar keine eigentliche Energiemessung an dem System vorgenommen hat.

Die Größe

$$Z = \operatorname{Sp} e^{-\beta \mathscr{H}} \tag{32}$$

nennt man *Zustandssumme*. Man kann sie in irgendeinem Basissystem berechnen, das nicht notwendig aus Energieeigenvektoren bestehen muß. Weil der HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ von äußeren Parametern, wie dem Volumen V des Systems oder dem von außen angelegten Magnetfeld $\mathfrak{H}$ abhängt, wird die Zustandssumme eine Funktion der Temperatur und dieser Parameter,

$$Z = Z(T, V, \mathfrak{H}, \ldots). \tag{33}$$

In der statistischen Thermodynamik zeigt man, daß zwischen Z und der freien Energie $F(T, V, \mathfrak{H}, \ldots)$ der Zusammenhang

$$F = -kT \ln Z \tag{34}$$

besteht. Durch Differentiation ergeben sich hieraus Entropie, Druck, Magnetisierung und alle weiteren thermodynamischen Zustandsgrößen. Die Berechnung der Zustandssumme (32) ist daher der Ausgangspunkt jeder atomistischen Herleitung von Zustandsgleichungen (vgl. Aufg. 106).

Aufg. 81: Man zeige daß die relative Energiestreuung von N Teilchen im thermischen Gleichgewicht proportional $1/\sqrt{N}$ ist.

§ 3. Der statistische Operator nach dem Meßprozeß

a) Der statistische Operator nach Ablesung eines Meßwertes

Wir wollen nun den Einfluß des Meßprozesses auf den statistischen Operator

$$\rho = \sum p^\alpha \mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}$$

untersuchen und damit die Überlegungen von 3.3 § 4 auf ein quantentheoretisches Gemisch erweitern. Welcher statistische Operator

$$\rho' = \sum p'^\alpha \mathscr{P}_{|\Phi'^\alpha\rangle}$$

---

[1]) Das heißt aber nicht, daß tatsächlich ein Gemisch von Energieeigenvektoren vorliegt, weil ein gegebenes ρ aus irgendwelchen $|\Phi^\alpha\rangle$ aufgebaut werden kann.

liegt nach Ausführung der Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ und Feststellung des Meßwertes Λ' vor?[1]) Zur Beantwortung dieser Frage benützen wir, daß nach Gl. (3.3–34) der Zustandsvektor durch die Messung in den Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$, der zum Meßwert Λ' gehört, projiziert wird. Damit gilt für jeden Zustandsvektor $|\Phi^\alpha\rangle$ des Gemischs

$$|\Phi^\alpha\rangle \xrightarrow{\Lambda'} |\Phi'^\alpha\rangle = \frac{\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}|\Phi^\alpha\rangle}{\|\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\Phi^\alpha\|}. \tag{35}$$

Darin ist $\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}$ der Projektionsoperator auf den Eigenraum $\mathfrak{u}_{\Lambda'}$. Dieser Übergang erfolgt nach Gl. (3.3–39) mit den Wahrscheinlichkeiten

$$w^\alpha_{\Lambda'} = \langle\Phi^\alpha \mid \mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\Phi^\alpha\rangle = \mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}. \tag{36}$$

Die Gewichte p'^α des Gemischs nach Ausführung der Messung sind daher proportional zu $p^\alpha w^\alpha_{\Lambda'}$,

$$p'^\alpha = c p^\alpha w^\alpha_{\Lambda'} = c p^\alpha\,\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}. \tag{37}$$

Der Normierungsfaktor c bestimmt sich aus $\sum\limits_\alpha p'^\alpha = 1$. Es gilt also

$$p'^\alpha = \frac{p^\alpha\,\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}}{\sum p^\alpha\,\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}} = \frac{p^\alpha}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho}\,\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}. \tag{38}$$

Für den statistischen Operator ρ' nach der Messung ergibt sich daher mit Gl. (35)

$$\rho' = \sum_\alpha \frac{p^\alpha}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho}\,\mathrm{Sp}\left(\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}\right)\frac{\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}}$$

$$= \frac{\sum\limits_\alpha p^\alpha\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho},$$

d. h.,

$$\boxed{\rho \xrightarrow{\Lambda'} \rho' = \frac{\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho}}\,.^{2)} \tag{39}$$

Einige Spezialfälle seien erwähnt:

1. Für $\rho = \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ gelangt man natürlich wieder zur Filterung des reinen Zustandes zurück (Aufg. 63).

---

[1]) Wir beschränken uns in diesem Paragraphen der Einfachheit halber auf diskrete Eigenwerte.

[2]) Weil man in der Spur die Reihenfolge zweier Operatoren vertauschen darf, kann man für den Nenner $\mathrm{Sp}(\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho\,\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}) = \mathrm{Sp}(\mathscr{P}_{\mathfrak{u}_{\Lambda'}}\rho)$ schreiben.

2. Hat man über den Zustand des Systems vor der Messung überhaupt keine Auskunft, so ergibt sich durch Messung von Λ'

$$\rho = \frac{\mathbf{1}}{\mathrm{Sp}\,\mathbf{1}} \xrightarrow{\Lambda'} \rho' = \frac{\mathscr{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}\,\mathscr{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}} = \frac{\delta(\mathscr{L} - \Lambda'\,\mathbf{1})}{\mathrm{Sp}\,\delta(\mathscr{L} - \Lambda'\,\mathbf{1})}\,. \tag{40}$$

Die letzte Gleichung folgt unmittelbar aus der Spektraldarstellung von $\mathscr{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}$. Für $\mathscr{L} = \mathscr{H}$ ist dies gerade der mikrokanonische statistische Operator (30).

3. Ist der Eigenwert Λ' *nicht entartet, so entsteht durch seine Messung aus* ρ *ein reiner Zustand.* Aus Gl. (39) folgt dann nämlich

$$\rho \xrightarrow{\Lambda'} \rho' = \frac{|u_{\Lambda'}\rangle\,\langle u_{\Lambda'}|\rho\, u_{\Lambda'}\rangle\,\langle u_{\Lambda'}|}{\langle u_{\Lambda'}|\rho\, u_{\Lambda'}\rangle} = |u_{\Lambda'}\rangle\,\langle u_{\Lambda'}| = \mathscr{P}_{|u_{\Lambda'}\rangle}\,. \tag{41}$$

Es liegt eine „*vollständige Messung*" vor, der Zustandsvektor wird durch sie völlig festgelegt. —

Tritt z. B. bei dem in 3.3 § 4 diskutierten STERN-GERLACH-Experiment (Fig. 50) ein Teilchen ein, über dessen Drehimpulszustand man keine Information besitzt, so wird es (bezüglich der drei Drehimpulszustände, die dort allein quantentheoretisch betrachtet wurden) *vor* Ausführung des Experiments durch den statistischen Operator

$$\rho = \frac{\mathbf{1}}{\mathrm{Sp}\,\mathbf{1}} = \frac{1}{3}\,\mathbf{1}$$

beschrieben. Wird das Elektron nach Durchlaufen der Apparatur von dem Absorber nicht eingefangen, so liegt hernach der reine Zustand

$$\mathscr{P}_{|\Phi'\rangle} = |u_+\rangle\,\langle u_+|$$

vor.

b) Der statistische Operator nach einer Messung, bei der vom Meßergebnis nicht Kenntnis genommen wird

Wird von einer Meßapparatur die Messung einer Observablen $\mathscr{L}$ ausgeführt, d. h. das Meßergebnis makroskopisch fixiert, nimmt man aber aus irgendwelchen Gründen von dem Meßergebnis keine Kenntnis, so besitzt man von dem System eine geringere Information als sie der statistische Operator ρ' in Gl. (39) beschreibt.[1]) Der in diesem Fall vorliegende statistische Operator $\bar{\rho}$ ergibt sich, wenn man die Wahrscheinlichkeit $w_{\Lambda'}$ für das Eintreten des Meßwertes Λ' [Gl. (20)] als Gewicht von ρ' betrachtet, d. h. $w_{\Lambda'}\,\rho'$ bildet und über alle Meßwerte summiert,

$$\boxed{\rho \to \bar{\rho} = \sum_{\Lambda} \mathscr{P}_{\mathrm{u}_\Lambda}\,\rho\,\mathscr{P}_{\mathrm{u}_\Lambda}}\,. \tag{42}$$

[1]) In der klassischen Statistik heißt dies, daß man z. B. bereits gewürfelt, aber noch nicht „abgelesen" hat. Das Ergebnis steht also schon fest, aber man hat noch keine Information darüber.

Sind die Eigenwerte Λ nicht entartet, so erhält man für

$$\bar{\rho} = \sum_{\Lambda} \langle u_\Lambda | \rho u_\Lambda \rangle \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle} = \sum_{\Lambda} w_\Lambda \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}. \tag{42a}$$

Liegt außerdem vor der Messung ein reiner Zustand $\rho = \mathscr{P}_{|\Phi\rangle}$ vor, so ergibt sich ohne „Ablesen" des Meßwertes durch die Messung das Gemisch

$$\boxed{\mathscr{P}_{|\Phi\rangle} \rightarrow \bar{\rho} = \sum_{\Lambda} |\langle u_\Lambda | \Phi \rangle|^2 \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}}. \tag{42b}$$

Stellt man an einem Meßgerät den Meßwert Λ' fest, so geht $\bar{\rho}$ in ρ' über. Diese Ablesung ist keine spezifisch quantenmechanische Frage, sondern eine solche, die auch in der klassischen statistischen Mechanik vorkommt.

c) Der statistische Operator nach einer Messung, bei der vom Meßergebnis nur teilweise Kenntnis genommen wird

Hat man ein Meßgerät vorliegen, das eine *Ungenauigkeit* $\delta\Lambda$ *in der Anzeige* besitzt, so werden alle Meßwerte Λ in einem Intervall $\Lambda_1 \ldots \Lambda_2 = \Lambda_1 + \delta\Lambda$ nicht „abgelesen". Den statistischen Operator $\bar{\rho}_{\Lambda_1 \ldots \Lambda_2}$ des Systems nach einer solchen Messung erhält man aus Gl. (39) durch Multiplikation mit den Gewichten[1])

$$p_{\Lambda'} = \begin{cases} \dfrac{w_{\Lambda'}}{\sum\limits_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_2} w_{\Lambda'}} & \text{für } \Lambda' \text{ in } \Lambda_1 \cdots \Lambda_2 \\ 0 & \text{für } \Lambda' \text{ außerhalb,} \end{cases}$$

und Summation über Λ',

$$\boxed{\rho \rightarrow \bar{\rho}_{\Lambda_1 \ldots \Lambda_2} = \frac{\sum\limits_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_2} \mathscr{P}_{u_\Lambda} \rho \mathscr{P}_{u_\Lambda}}{\sum\limits_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_2} \mathrm{Sp}(\mathscr{P}_{u_\Lambda} \rho)}}. \tag{43}$$

Die Gl. (39) und (42) sind natürlich Spezialfälle dieser Gleichung. — Ist insbesondere ρ ein reiner Zustand und sind die Eigenwerte Λ nicht entartet, so ergibt sich

$$\mathscr{P}_{|\Phi\rangle} \rightarrow \bar{\rho}_{\Lambda_1 \ldots \Lambda_2} = \frac{\sum\limits_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_2} |\langle u_\Lambda | \Phi \rangle|^2 \mathscr{P}_{|u_\Lambda\rangle}}{\sum\limits_{\Lambda=\Lambda_1}^{\Lambda_2} |\langle u_\Lambda | \Phi \rangle|^2}. \tag{44}$$

Aus dem reinen Zustand wird ein Gemisch [vgl. Gl. (28)].

---

[1]) Statt des scharfen Abschneidens aller Meßwerte außerhalb $\delta\Lambda$ kann man auch eine Gewichtsfunktion einführen, die im subjektiven Ermessen des Experimentators steht.

An dieser Stelle sei auf eine gewisse Problematik hingewiesen: Für die Gültigkeit der Gl. (43) wurde vorausgesetzt, daß die dem Operator $\mathscr{L}$ zugeordnete Meßapparatur die Observable scharf mißt, die Anzeige aber eine gewisse Ungenauigkeit besitzt. Bei Vorliegen einer realen Meßapparatur ist es jedoch häufig schwer zu entscheiden, ob es sich lediglich um eine Ungenauigkeit in der Anzeige oder um eine wesentliche Eigenschaft der Observablen selbst handelt. In letzterem Fall ist die Veränderung von ρ durch Gl. (39) gegeben.

Aufg. 82: Im STERN-GERLACH-Experiment (Fig. 50, S. 184) werde der Absorber so aufgestellt, daß nur die $|u_-\rangle$-Zustände herausgefiltert werden. Wie lautet ρ'?

§ 4. Dynamik eines quantentheoretischen Gemisches

Für die Behandlung der quantentheoretischen Dynamik eines Systems ist es notwendig, auch für ρ ein Bewegungsgesetz anzugeben, das dann erlaubt, die Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten

$$\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \mathrm{Sp}\big(\rho(t)\, \mathscr{L}(t)\big) \tag{45}$$

ebenso zu berechnen wie im reinen Zustand (Kap. 3.5). Der Unterschied gegenüber dem reinen Zustand kommt in den Gewichten p^α zum Ausdruck, die die fehlende Information über den im Gemisch tatsächlich vorliegenden Zustandsvektor beschreiben. Weil in der quantentheoretischen Dynamik das System sich selbst überlassen ist und keine Messungen an dem System ausgeführt werden, ändert sich die Information über den Zustand nicht, die p^α sind keine Zeitfunktionen,

$$\dot{p}^\alpha = 0. \tag{46}$$

Andererseits muß nach Gl. (3.5–3) für jedes $\mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}$ des Gemisches

$$\mathring{\mathscr{P}}_{|\Phi^\alpha\rangle} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}] + \left(\frac{\partial \mathscr{P}_{|\Phi^\alpha\rangle}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathcal{O} \tag{47}$$

gelten. Multiplizieren wir diese Gleichung mit den zeitunabhängigen p^α und summieren wir über α, so erhalten wir für ρ die fundamentale Gleichung

$$\boxed{\mathring{\rho} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \rho] + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \mathcal{O}}\,. \tag{48}$$

Die Beziehung steht in Analogie zur LIOUVILLEschen Gleichung der klassischen Mechanik: Weil die durch ϱ beschriebenen Phasenraumpunkte im Laufe der Zeit weder entstehen noch verschwinden, ist die substantielle zeitliche Veränderung der Phasenraumdichte $\varrho(x_1, \ldots, p_1, \ldots, t)$ (t = explizite Zeitabhängigkeit) null,

$$\frac{\mathrm{d}\varrho}{\mathrm{d}t} = \{H, \varrho\} + \left(\frac{\partial \varrho}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = 0 \tag{49}$$

(LIOUVILLEsche Gleichung).

Alles was über die Bedeutung der Gl. (3.5–3) und ihre Anwendungen im Kap. 3.5 gesagt wurde, überträgt sich ohne weiteres auf die Beziehung (48). In

einem beliebigen, durch einen HERMITEschen Operator $\mathscr{X}(t)$ definierten Bild führt die Gl. (3.5–20) auf

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H}(t) - \mathscr{X}(t), \rho(t)\right]}. \tag{50}$$

Hierdurch wird die in dem Bild herrschende totale zeitliche Veränderung von $\rho(t)$ bestimmt. Ihre Integration erfolgt wieder durch den unitären Operator $\mathscr{C}(t, t_0)$ [Gl. (3.5–28)],

$$\rho(t) = \mathscr{C}(t, t_0)\, \rho(t_0)\, \mathscr{C}^\dagger(t, t_0). \tag{51}$$

Im SCHRÖDINGER-Bild spezialisiert sich Gl. (50) zu

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho^S}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H}^S, \rho^S\right]}. \tag{50S}$$

Diese Beziehung nennt man die VON-NEUMANN-*Gleichung*. Im HEISENBERG-Bild hingegen wird

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho^H}{\mathrm{d}t} = 0}, \tag{50H}$$

der statistische Operator ruht, die gesamte Dynamik wird von den Observablen $\mathscr{L}^H(t)$ übernommen. Für das Wechselwirkungsbild ergibt sich schließlich

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\rho^W}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H}_1^W, \rho^W\right]}. \tag{50W}$$

$\rho^W(t)$ verändert sich nach Maßgabe der Wechselwirkung $\mathscr{H}_1^W(t)$.

Das EHRENFESTsche Theorem gilt auch für ein Gemisch. Für eine beliebige Observable erhält man nämlich nach den Gleichungen (50) und (3.5–20)

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\mathscr{L}\rangle &= \mathrm{Sp}\left(\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}\mathscr{L} + \rho\frac{\mathrm{d}\mathscr{L}}{\mathrm{d}t}\right) \\
&= \mathrm{Sp}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H} - \mathscr{X}, \rho\right]\mathscr{L} + \rho\,\mathring{\mathscr{L}} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\rho\left[\mathscr{H} - \mathscr{X}, \mathscr{L}\right]\right) \\
&= \mathrm{Sp}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\mathscr{H} - \mathscr{X}, \rho\,\mathscr{L}\right] + \rho\,\mathring{\mathscr{L}}\right).
\end{aligned}$$

Wegen der Vertauschbarkeit zweier Operatoren unter der Spur verschwindet die Spur des Kommutators, und wir erhalten

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\mathscr{L}\rangle = \mathrm{Sp}\left(\rho\,\mathring{\mathscr{L}}\right) = \langle\mathring{\mathscr{L}}\rangle}. \tag{52$_1$}$$

Setzen wir den Ausdruck (3.2-29) für $\overset{\circ}{\mathscr{L}}$ ein, so finden wir für die zeitliche Veränderung des Erwartungswertes

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathscr{L} \rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \operatorname{Sp} \rho \, [\mathscr{H}, \mathscr{L}] + \operatorname{Sp} \rho \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t} \right)_{\mathrm{ex}} \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \operatorname{Sp} [\rho, \mathscr{H}] \, \mathscr{L} + \operatorname{Sp} \rho \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t} \right)_{\mathrm{ex}} . \end{aligned} \tag{52_2}$$

Die zweite Zeile folgt aus der ersten, wenn man berücksichtigt, daß man unter der Spur die Reihenfolge der Faktoren zyklisch vertauschen darf.

Hat ein statistischer Operator ρ_0 die Eigenschaft, daß er mit $\mathscr{H}$ vertauscht,

$$[\rho_0, \mathscr{H}] = \mathcal{O} , \tag{53}$$

so nennt man ihn *stationär*. Der Erwartungswert irgendeines explizit zeitunabhängigen Operators $\mathscr{L}$ ist dann nämlich nach Gl. (52_2) zeitlich konstant,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathscr{L} \rangle = 0 . \tag{54}$$

Beispiele für stationäre ρ_0 sind der mikrokanonische und der kanonische statistische Operator [Gl. (30) u. (31)].

Befindet sich ein makroskopisches System in einem thermischen Gleichgewichtszustand der Temperatur T, so wird es durch ein kanonisches ρ_0 beschrieben. Stört man von einem bestimmten Augenblick ($t = 0$) an das Gleichgewicht durch Veränderung des HAMILTON-Operators,

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1(t) \qquad (t \geq 0) ,$$

wobei $\mathscr{H}_1(t)$ die explizit zeitabhängige Störung beschreibt, so bestimmt sich der statistische Operator $\rho(t)$ zu einer späteren Zeit t aus Gl. (50). Zusammen mit Gl. (3.5-20) erhält man damit die durch die Störung bedingte Veränderung der Erwartungswerte $\langle \mathscr{L} \rangle (t)$ der Observablen des Systems.

Zur Berechnung der Zeitfunktionen $\langle \mathscr{L} \rangle (t)$ bedienen wir uns des Wechselwirkungsbildes,

$$\mathscr{L}^W(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t} \, \mathscr{L}(0) \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t} ,$$

$$\mathscr{H}_1^W(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t} \, \mathscr{H}_1(t) \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t} .$$

Die Gl. (50W) für $\rho^W(t)$ lösen wir iterativ [vgl. dazu 3.5 § 7]:

$$\rho^W(t) = \rho_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t [\mathscr{H}_1^W(t'), \rho_0] \, \mathrm{d}t' + \cdots \tag{55}$$

Damit erhalten wir für den Erwartungswert $\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \operatorname{Sp}(\mathscr{L}^W(t) \, \rho^W(t))$, wenn wir berücksichtigen, daß ρ_0 mit $\mathscr{H}_0$ kommutiert,

$$\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \langle \mathscr{L} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t \operatorname{Sp}\left(\mathscr{L}^W(t) \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t'} [\mathscr{H}_1(t'), \rho_0] \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t'} \right) \mathrm{d}t' + \cdots$$

Weil man unter der Spur die Operatoren zyklisch vertauschen darf [vgl. Aufg. 37], können wir auch schreiben

$$\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \langle \mathscr{L} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t \mathrm{Sp} \left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathscr{H}_0 t'} \mathscr{L}^W(t) \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathscr{H}_0 t'} [\mathscr{H}_1(t'), \rho_0] \right) \mathrm{d}t' + \cdots$$

$$= \langle \mathscr{L} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t \mathrm{Sp} \left(\mathscr{L}^W(t - t') \, [\mathscr{H}_1(t'), \rho_0] \right) \mathrm{d}t' + \cdots$$

$$= \langle \mathscr{L} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t \mathrm{Sp} \left([\mathscr{L}^W(t - t'), \mathscr{H}_1(t')] \, \rho_0 \right) \mathrm{d}t' + \cdots,$$

oder

$$\boxed{\langle \mathscr{L} \rangle (t) = \langle \mathscr{L} \rangle_0 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int_0^t \langle [\mathscr{L}^W(t - t'), \mathscr{H}_1(t')] \rangle_0 \, \mathrm{d}t' + \cdots} \, . \tag{56}$$

Dabei soll $\langle \cdots \rangle_0$ den Erwartungswert, gebildet mit dem zur Zeit $t < 0$ vorliegenden stationären, statistischen Operator $\rho_0 = \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0} / \mathrm{Sp}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0}$, bedeuten. Begnügt man sich mit dem hier angeschriebenen Term, so hat man die „Antwort“ $\langle \mathscr{L} \rangle (t)$ des Systems auf die Störung $\mathscr{H}_1(t')$ in erster Näherung vor sich (*Lineare Übertragungstheorie*).

Identifiziert man zum Beispiel $\mathscr{L}$ mit dem Magnetisierungsoperator einer Probe

$$\mathscr{M}_i = \sum_{\nu=1}^{N} m_i^\nu \qquad (i = x, y, z)$$

und ist

$$\mathscr{H}'_1(t) = - \sum_i \mathscr{M}_i \, H_i(t)$$

die Störenergie, hervorgerufen durch ein irgendwie zeitlich veränderliches äußeres Magnetfeld $H_i(t)$ [vgl. Gl. (1.2-90)], so erhält man als lineare Antwort die zeitabhängige Magnetisierung

$$M_i(t) = \langle \mathscr{M}_i \rangle (t)$$

$$= M_i(H_0, T) + \int_0^t \sum_k \varphi_{ik}(t - t', H_0, T) \, H_k(t') \, \mathrm{d}t'$$

$$= M_i(H_0, T) + \int_0^t \sum_k \varphi_{ik}(t'', H_0, T) \, H_k(t - t'') \, \mathrm{d}t'' \, . \tag{57}$$

Dabei bedeutet H_0 ein bereits für $t < 0$ vorhandenes statisches Magnetfeld. $M_i(H_0, t)$ ist die Gleichgewichtsmagnetisierung bei der Temperatur T. Die der Störung $H_k(t)$ folgende Antwort $M_i(t) - M_i(H_0, T)$ wird nach Gl. (56) durch

den *linearen Übertragungstensor*

$$\left.\begin{array}{l} \boxed{\varphi_{ik}(t, H_0, T) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle [\mathcal{M}_i^W(t), \mathcal{M}_k(0)] \rangle_0} \qquad (t \geq 0)^{1)} \\ \text{mit} \quad \mathcal{M}_i^W(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t} \mathcal{M}_i(0)\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t} \end{array}\right\} \tag{58}$$

bestimmt.

Zwei Spezialfälle mögen dieses Ergebnis beleuchten.

1. Auf eine δ-artige Magnetfeldänderung,

$$H_k(t) = h_k\, \delta(t),$$

folgt die Magnetisierung

$$M_i(t) = M_i(H_0, T) + \sum_k \varphi_{ik}(t, H_0, T)\, h_k. \tag{59}$$

Diese Änderung der Gleichgewichtsmagnetisierung verschwindet für ein System im Wärmebad der Temperatur T nach einer gewissen Zeit τ (Relaxationszeit) wieder, φ_{ik} geht für $t > \tau$ gegen Null.

2. Eine periodische Magnetfeldänderung

$$H_k(t) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad t < 0 \\ \operatorname{Re} h_k\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} & \text{für} \quad t \geq 0 \end{cases}$$

ergibt

$$M_i(t) = M_i(H_0, T) + \operatorname{Re} \sum_k \int_0^t \varphi_{ik}(t'', H_0, T)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t'')}\, h_k\, \mathrm{d}t''.$$

Für Zeiten $t > \tau$ ist φ_{ik} praktisch abgeklungen, so daß man die obere Grenze nach $+\infty$ verlegen kann. Im eingeschwungenen Zustand erhält man daher

$$M_i(t) = M_i(H_0, T) + \operatorname{Re} \sum_k \chi_{ik}(\omega, H_0, T)\, h_k\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}. \tag{60}$$

Der dabei auftretende *komplexe Suszeptibilitätstensor*

$$\boxed{\chi_{ik}(\omega, H_0, T) = \int_0^\infty \varphi_{ik}(t'', H_0, T)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t''}\, \mathrm{d}t''} \tag{61}$$

ist also die FOURIER-Transformierte des Übertragungstensors (58).

Analoge Überlegungen lassen sich im Fall eines elektrischen Feldes anstellen. Man gelangt damit zur Theorie des *Dielektrizitäts- und Leitfähigkeitstensors.*

Aufg. 83: Zur Zeit $t = 0$ sei an einem System ein n_a-facher Eigenwert von $\mathcal{H}_0$ gemessen worden. Wie groß ist — unter dem Einfluß eines Gesamt-HAMILTON-Operators $\mathcal{H}$ — die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{E_a \to E_b}(t)$ in einen n_b-fachen Eigenwert E_b von $\mathcal{H}_0$?

---

[1]) Für $t < 0$ definiert man entsprechend Gl. (57) $\varphi_{ik}(t, H_0, T) \equiv 0$. Hierin kommt die *Kausalität* zum Ausdruck: Die Antwort kann nicht vor der Störung erfolgen.

VIERTER TEIL

Durchführung der Theorie

Erstes Kapitel

Systeme mit Observablen, die nur von Ort und Impuls abhängen

Es sollen zunächst Systeme mit fester Teilchenzahl betrachtet werden, die keine inneren Freiheitsgrade (wie den Spin) besitzen, so daß man mit der Quantisierung der klassischen Mechanik auskommt.

§ 1. Ortsdarstellung eindimensionaler Probleme

Um die Gleichungen durch Indizes nicht zu unübersichtlich zu machen, mögen vorerst nur eindimensionale Probleme behandelt werden. Jede Observable ist dann darstellbar durch einen HERMITEschen Operator $\mathscr{F}$, der eine Funktion der Operatoren x und p und evtl. des Zeitparameters t ist. Wegen [Gl. (3.2–17)]

$$[\mathscr{F}, x] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial p} \tag{1}$$

kommutiert $\mathscr{F}$ nur dann mit x, wenn $\mathscr{F}$ unabhängig von p, also eine reine Funktion von x (und evtl. des Parameters t) ist.[1]) Bis auf Funktionen $\mathscr{F}(x)$ gibt es keine Observablen, die mit x vertauschen. Die Kommutatorrelationen zeigen also, daß der Ortsoperator x für die betrachteten eindimensionalen Probleme ein vollständiger Operator ist (Kap. 3.4). Die durch die Eigenwert-

[1]) Bringt man nämlich $\mathscr{F}(x, p)$ vermöge der Vertauschungsrelation zwischen x und p in die Gestalt $\sum_{\nu=0}^{\infty} f_\nu(x)\, p^\nu$, so folgt aus der Forderung $[\mathscr{F}, x] = \mathcal{O}$, daß $\mathscr{G}(x, p) \equiv \sum_{\nu=1}^{\infty} f_\nu(x)\, \nu\, p^{\nu-1} = \mathcal{O}$ sein muß. Nach Gl. (2.2–34) und (3.2–18) gilt dann für jede Zahl α

$$\mathcal{O} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha x}\, \mathscr{G}(x, p)\, \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha x} = \mathscr{G}\left(x, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha x}\, p\, \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha x}\right) = \mathscr{G}(x, p + \alpha \mathbf{1}).$$

Daher verschwinden alle Anteile $f_\nu(x)$ mit $\nu \geqq 1$. Es vertauschen mit x also nur die Funktionen $\mathscr{F}(x, p)$, die sich vermöge der Vertauschungsrelation zwischen x und p als reine Ortsfunktionen $f_0(x)$ schreiben lassen.

gleichung des Ortsoperators

$$x\,|u_x\rangle = x\,|u_x\rangle \tag{2}$$

definierten Ortseigenvektoren $|u_x\rangle$ sind somit nicht entartet und bilden daher ein vollständiges Basissystem des zu benutzenden unitären Raumes $\mathfrak{U}$.

Auch die Frage, welche Ortseigenwerte x möglich sind — und damit die Frage nach der Dimension des unitären Raumes — läßt sich mittels der Vertauschungsrelationen beantworten. Dazu betrachten wir den uns aus 3.6 § 5 bereits bekannten Operator

$$\mathscr{T}(\xi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi p}, \tag{3}$$

in dem ξ ein reeller Zahlenparameter ist. Aus den Vertauschungsrelationen (1) folgt dann

$$[\mathscr{T}(\xi), x] = -\xi\,\mathscr{T}(\xi). \tag{4}$$

Durch Anwendung auf die Eigenvektoren $|u_x\rangle$ des Ortsoperators erhalten wir

$$\mathscr{T}(\xi)\,x\,|u_x\rangle - x\,\mathscr{T}(\xi)\,|u_x\rangle = -\xi\,\mathscr{T}(\xi)\,|u_x\rangle$$

oder

$$\boxed{x\,|\mathscr{T}(\xi)\,u_x\rangle = (x+\xi)\,|\mathscr{T}(\xi)\,u_x\rangle}\,, \tag{5}$$

d. h., der Vektor $|\mathscr{T}(\xi)\,u_x\rangle$ ist ebenfalls Eigenvektor von x, aber zum Eigenwert $x + \xi$. $|\mathscr{T}(\xi)\,u_x\rangle$ ist im unitären Raum „parallel" zum Vektor $|u_{x+\xi}\rangle$, d. h., $\mathscr{T}(\xi)$ ist — wie wir bereits aus 3.6 § 5 wissen — ein Operator, der die *Ortstranslation* um eine Strecke ξ beschreibt. Weil $\mathscr{T}(\xi)$ für alle reellen ξ unitär ist,

$$\mathscr{T}^\dagger(\xi) = e^{\frac{i}{\hbar}\xi p} = \mathscr{T}^{-1}(\xi), \tag{6}$$

ergibt sich, daß der Faktor C in der Gleichung für die Parallelität,

$$|\mathscr{T}(\xi)\,u_x\rangle = C(x,\xi)\,|u_{x+\xi}\rangle,$$

vom Betrag eins sein muß. Denn es ist

$$\begin{aligned}\delta(x,x') &= \langle u_x\,|\,u_{x'}\rangle = \langle \mathscr{T}(\xi)\,u_x\,|\,\mathscr{T}(\xi)\,u_{x'}\rangle = C^*(x,\xi)\,C(x',\xi)\,\langle u_{x+\xi}\,|\,u_{x'+\xi}\rangle\\ &= |C(x,\xi)|^2\,\delta(x+\xi, x'+\xi).\end{aligned}$$

Also

$$\mathscr{T}(\xi)\,|u_x\rangle = e^{ic(x,\xi)}\,|u_{x+\xi}\rangle \quad (c = \text{reell}). \tag{7}$$

Die Phase $c(x,\xi)$ setzen wir der Einfachheit halber null,

$$\boxed{\mathscr{T}(\xi)\,|u_x\rangle = |u_{x+\xi}\rangle}\,. \tag{8}$$

Da der Parameter ξ kontinuierlich alle Werte zwischen $-\infty$ und $+\infty$ annehmen kann, sind auch die *Eigenwerte x kontinuierlich*: $-\infty < x < +\infty$. Die

Eigenvektoren $|u_x\rangle$ sind daher auf die DIRACsche δ-Funktion zu normieren,

$$\langle u_x \mid u_{x'}\rangle = \delta(x - x'), \tag{9}$$

$|u_x\rangle$ hat die Dimension (Länge)$^{-1/2}$.

Die quantentheoretische Beschreibung des Systems erfolgt also in einem unendlich-dimensionalen, unitären Raum. Wegen der Vollständigkeit von x läßt sich jeder Vektor $|\varphi\rangle$ nach den $|u_x\rangle$ entwickeln,

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_x\rangle \langle u_x \mid \varphi\rangle \, \mathrm{d}x. \tag{10}$$

Die Komponenten

$$\langle u_x \mid \varphi\rangle = \varphi(x) \qquad (\textit{Ortsdarstellung}) \tag{11}$$

bilden eine Funktion des Eigenwertes x (Ortsfunktion). Der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ des Systems, der wegen der Normierbarkeit auf eins ein echter HILBERT-Raum-Vektor sein muß, hat die Komponenten

$$\langle u_x \mid \Phi\rangle = \Phi(x), \tag{12}$$

die eine quadratintegrable Funktion bilden,

$$\langle \Phi \mid \Phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \Phi \mid u_x\rangle \langle u_x \mid \Phi\rangle \, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1. \tag{13}$$

Wie wir in 3.3 § 5 allgemein gesehen haben, ist $\Phi(x)$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für eine Ortsmessung. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Ortsintervall $x \dots x + \mathrm{d}x$ anzutreffen, wenn vor der Ortsmessung der Zustand $|\Phi\rangle$ vorliegt, lautet

$$w_{x\dots x+\mathrm{d}x} = |\langle u_x \mid \Phi\rangle|^2 \, \mathrm{d}x = |\Phi(x)|^2 \, \mathrm{d}x. \tag{14}$$

Auch die *Wirkung des Impulsoperators* p auf die Ortseigenvektoren $|u_x\rangle$ läßt sich aus den Vertauschungsrelationen herleiten. Dazu betrachten wir eine infinitesimale Translation $\delta\xi$, die im unitären Raum durch den unitären Operator $\mathcal{T}(\delta\xi)$ dargestellt wird, welcher durch Reihenentwicklung aus (3) hervorgeht.

$$\mathcal{T}(\delta\xi) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \, p \, \delta\xi. \tag{15}$$

Aus Gl. (8) wird dann

$$|u_x\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \, p \, \delta\xi \, |u_x\rangle = |u_{x+\delta\xi}\rangle$$

oder

$$p \, |u_x\rangle = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{|u_{x+\delta\xi}\rangle - |u_x\rangle}{\delta\xi}.$$

Die rechte Seite stellt die differentielle Veränderung des Eigenvektors $|u_x\rangle$ dar, wenn man den (kontinuierlichen!) Eigenwert x um $\delta\xi$ vermehrt. Für $\delta\xi \to 0$ erhält man den Differentialquotienten

$$\boxed{p \, |u_x\rangle = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}|u_x\rangle}{\mathrm{d}x}}. \tag{16}$$

Geht man an Stelle von Gl. (8) von der Gl. (7) aus, so gilt für infinitesimales $\delta\xi$

$$e^{ic(x,\xi)} = e^{ic(x,0)}\left\{1 + i\left(\frac{\partial c(x,\xi)}{\partial \xi}\right)_{\xi=0} \delta\xi\right\}.$$

Wegen $\mathscr{T}(\xi = 0) = \mathit{1}$ ist $c(x, 0) = 0$, und man erhält mit Gl. (15)

$$|u_x\rangle - \frac{i}{\hbar}\, p\, \delta\xi\, |u_x\rangle = |u_{x+\delta\xi}\rangle - i f(x)\, \delta\xi\, |u_{x+\delta\xi}\rangle,$$

wenn man

$$-\left(\frac{\partial c(x,\xi)}{\partial \xi}\right)_{\xi=0} = f(x)$$

setzt. An Stelle von Gl. (16) ergibt sich damit

$$p\,|u_x\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{d|u_x\rangle}{dx} + \hbar f(x)\,|u_x\rangle \tag{17}$$

mit einer beliebigen reellen Funktion $f(x)$. Durch geeignete Phasenwahl von $|u_x\rangle$ läßt sich aber $f(x)$ zu Null machen, so daß man sich mit der Form (16) begnügen kann.

Mit Gl. (16) sind wir imstande, die *Wirkung von p in der Ortsdarstellung* anzugeben. Wegen der HERMITEizität von p gilt nämlich

$$\langle u_x \mid p\,\varphi\rangle = \langle p\, u_x \mid \varphi\rangle = +\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle u_x \mid \varphi\rangle;$$

dabei ist zu beachten, daß jetzt — im Gegensatz zu Gl. (16) — ein $+$-Zeichen stehen muß, weil ein komplexer Faktor im bra-Vektor konjugiert komplex aus dem Skalarprodukt heraustritt. Man erhält also die Komponenten $\langle u_x \mid p\,\varphi\rangle = p\,\varphi(x)$ des Vektors $|\,p\,\varphi\rangle$ in Richtung der Ortseigenvektoren $|u_x\rangle$, indem man die Komponenten $\langle u_x \mid \varphi\rangle = \varphi(x)$ differenziert,

$$\boxed{p\,\varphi(x) = +\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\varphi(x)}\,. \tag{18}$$

Der HAMILTON-Operator eines Teilchens im Potential $\mathscr{V}(x)$

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\, p^2 + \mathscr{V}(x) \tag{19}$$

bewirkt damit die Vektorzuordnung

$$\mathscr{H}\,|u_x\rangle = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}|u_x\rangle. \tag{20}$$

Hieraus folgt wegen der HERMITEizität von $\mathscr{H}$

$$\boxed{\langle u_x \mid \mathscr{H}\,\varphi\rangle \equiv \mathscr{H}\varphi(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\varphi(x)}\,. \tag{20a}$$

Diese Gleichung gibt also an, wie man aus einem beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$, der die Komponenten $\langle u_x \mid \varphi\rangle = \varphi(x)$ hat, den Vektor $|\mathscr{H}\,\varphi\rangle$ mit den Komponenten $\langle u_x \mid \mathscr{H}\,\varphi\rangle = \mathscr{H}\,\varphi(x)$ erhält *(Wirkung des HAMILTON-Operators in der Ortsdarstellung)*.

Die SCHRÖDINGER-*Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsamplitude* $\Phi(x, t)$ [Gl. (3.5–43)] der eindimensionalen Bewegung eines Teilchens im Potential $V(x)$ lautet daher

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right\}\Phi(x,t)}\,. \tag{21}$$

Sie hat dieselbe Gestalt wie die Gl. (1.3–32) für die Materiefeldverteilung $\psi(x, t)$ [vgl. dazu 3.1 § 4].

Aufg. 84: Welche Wirkung besitzt der Translationsoperator in der Ortsdarstellung?

Aufg. 85: Wie transformiert sich die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(x, t)$ bei einer GALILEI-Transformation?

Aufg. 86: Wie lauten die Matrixelemente von $\mathfrak{x}$, $\mathfrak{p}$, $\mathscr{H}$ in der Ortsdarstellung?

Aufg. 87: Man verifiziere die Vertauschungsrelationen zwischen $\mathfrak{x}$ und $\mathfrak{p}$ in den Matrixelementen der Ortsdarstellung.

Aufg. 88: Welche Gestalt muß die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(x)$ besitzen, damit sich in der Unschärferelation zwischen Impuls und Ort das Gleichheitszeichen ergibt?

§ 2. Eigenwertprobleme in der Ortsdarstellung

In der Ortsdarstellung werden die Eigenwertgleichungen zu *Differentialgleichungen.*

Für die Eigenvektoren $|u_p\rangle$ des *Impulsoperators,*

$$\mathfrak{p}\,|u_p\rangle = p\,|u_p\rangle, \tag{22}$$

erhält man durch skalare Multiplikation mit $\langle u_x|$ die Ortsdarstellung

$$\langle u_x\,|\,\mathfrak{p}\,u_p\rangle \equiv \mathfrak{p}\,u_p(x) = p\,u_p(x),$$

die nach Gl. (18) zur Differentialgleichung

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}u_p(x)}{\mathrm{d}x} = p\,u_p(x) \tag{23}$$

wird. Die Integration ergibt

$$u_p(x) = c\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\,. \tag{24}$$

Aus dem Orthonormierungsintegral

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_{p'}^*(x)\,u_p(x)\,\mathrm{d}x = |c|^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p-p')x}\,\mathrm{d}x = |c|^2\,2\pi\hbar\,\delta(p-p')$$

erhält man $c = (2\pi\hbar)^{-1/2}$ — bis auf eine willkürliche Phase — und damit die auf die δ-Funktion orthonormierten *Impulseigenfunktionen*

$$\boxed{\langle u_x\,|\,u_p\rangle \equiv u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}\,. \tag{25}$$

Die Eigenwerte p des Impulsoperators liegen kontinuierlich auf der p-Achse zwischen $-\infty$ und $+\infty$.

Führt man eine in der Grenze scharfe Ortsmessung aus, so lautet nach Gl. (3.3–32) der Zustandsvektor nach dieser Messung

$$|\Phi\rangle = |u_x\rangle \sqrt{\mathrm{d}x}\,.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß bei einer unmittelbar darauffolgenden Impulsmessung der Impuls im Intervall $p \ldots p + \mathrm{d}p$ liegt, ist dann nach Gl. (3.3–35)

$$w_{p\ldots p+\mathrm{d}p} = |\langle\Phi \mid u_p\rangle|^2\,\mathrm{d}p = |\langle u_x \mid u_p\rangle|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p = \frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}, \qquad (26)$$

also *un*abhängig von p. Jeder Impulswert ist gleich wahrscheinlich; man kann nach einer scharfen Ortsmessung keine Aussagen über den Ausgang einer Impulsmessung machen.

Die *Energie*eigenvektoren $|u_E\rangle$, definiert durch die Gleichung

$$\mathscr{H}\,|u_E\rangle = E\,|u_E\rangle, \qquad (27)$$

bestimmen sich in der Ortsdarstellung $\langle u_x \mid u_E\rangle = u_E(x)$ nach Gl. (20a) aus der Differentialgleichung

$$\boxed{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right\} u_E(x) = E\,u_E(x)}\,, \qquad (28)$$

die mit der in der Wellenmechanik (1.5 § 1) angegebenen, zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung formal übereinstimmt. Wir können daher alle dort abgeleiteten Ergebnisse über die Struktur der Energieeigenfunktionen $u_E(x)$ und die Energieeigenwerte E, sowie auch die dort behandelten Beispiele übernehmen. Lediglich die Interpretation der Lösungen ist jetzt eine völlig andere. Es handelt sich nicht mehr um eine stationäre Verteilung des Materiefeldes, sondern um *Wahrscheinlichkeitsamplituden*. Es ist nämlich

$$|\langle u_E \mid u_x\rangle|^2\,\mathrm{d}x = |u_E(x)|^2\,\mathrm{d}x \qquad (29)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das System unmittelbar nach einer Energiemessung (mit dem Ergebnis E) bei einer Ortsmessung im Intervall $x \ldots x + \mathrm{d}x$ angetroffen wird, oder auch die Wahrscheinlichkeit, nach einer Ortsmessung (mit dem Ergebnis $x \ldots x + \mathrm{d}x$) bei einer Energiemessung den Eigenwert E zu finden. Diese Wahrscheinlichkeit wird i. allg. nicht zur Sicherheit, weil die Observablen Energie und Ort nicht verträglich sind; der Kommutator $[\mathscr{H}, x] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathring{x}$ ist ja — wegen des Beitrags der kinetischen Energie in $\mathscr{H}$ — von Null verschieden.

§ 3. Kontinuitätsgleichung, Stromoperator und Grenzbedingungen

Für das wellenmechanische Verhalten an Unstetigkeitsflächen war die *Kontinuitätsgleichung* (1.4–4) — als Folge der Schrödingerschen Feldgleichung — von entscheidender Bedeutung. Wir wollen nun eine entsprechende, quanten-

theoretische Gleichung in Operatorform herleiten. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für eine Ortsmessung ist gegeben durch den Erwartungswert des Projektionsoperators

$$\mathscr{P}_{|u_x\rangle} = |u_x\rangle\langle u_x| = \delta(x - x\,'),\ ^{1)}$$

der die Observable „Ist das System im Zustand $|u_x\rangle$?" beschreibt. Der Operator $\mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle}$ bedeutet daher die Observable „Wie verändert sich die Entscheidung, ob das System im Zustand $|u_x\rangle$ ist, zeitlich?" (vgl. 3.2 § 1 und 3.3 § 5). Der Erwartungswert

$$\langle \Phi \mid \mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle} \Phi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \Phi | \mathscr{P}_{|u_x\rangle} \Phi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} w_x$$

bestimmt die zeitliche Veränderung der Wahrscheinlichkeitsdichte w_x. Für $\mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle}$ und $\mathscr{P}_{|u_x\rangle}$ gilt nach Gl. (3.2-29) der Zusammenhang

$$\mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [\mathscr{H}, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}]\,. \tag{30}$$

Setzen wir den speziellen HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + \mathscr{V}(x) \tag{31}$$

ein, so ergibt sich wegen der Vertauschbarkeit von $\mathscr{V}(x)$ mit $\mathscr{P}_{|u_x\rangle}$

$$\mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle} = \frac{\mathrm{i}}{2\hbar m} [p^2, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}] = \frac{\mathrm{i}}{2\hbar m} \{[p, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}]\, p + p\,[p, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}]\}\,. \tag{32}$$

Den Kommutator $[p, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}]$ können wir mittels Gl. (16) ausrechnen. In Anwendung auf einen beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ erhält man nämlich

$$\begin{aligned}
[p, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}]\,|\varphi\rangle &= |\, p\, u_x\rangle \langle u_x | \varphi\rangle - |u_x\rangle \langle u_x \mid p\, \varphi\rangle \\
&= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(\frac{\mathrm{d}\,|u_x\rangle}{\mathrm{d}x} \langle u_x \mid \varphi\rangle + |u_x\rangle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \langle u_x \mid \varphi\rangle\right) \\
&= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} (|u_x\rangle \langle u_x \mid \varphi\rangle)\,,
\end{aligned}$$

d. h.

$$[p, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \mathscr{P}_{|u_x\rangle}\,. \tag{33}$$

Die Gl. (32) nimmt damit die Gestalt einer *Kontinuitätsgleichung* in Operatorform an,

$$\boxed{\mathring{\mathscr{P}}_{|u_x\rangle} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \dot{\mathscr{J}}_x = \mathscr{O}}\,, \tag{34}$$

wenn man als (HERMITEschen) *Stromoperator* definiert

$$\boxed{\dot{\mathscr{J}}_x = \frac{1}{2m} (\mathscr{P}_{|u_x\rangle}\, p + p\, \mathscr{P}_{|u_x\rangle})}\,. \tag{35}$$

---

[1]) Die zweite Gleichung folgt unmittelbar aus der Spektraldarstellung, durch die $\delta(x - x\,')$ definiert ist (2.3 § 3).

Dieser Operator bedeutet natürlich nicht eine gleichzeitige Messung von Ort und Impuls, sondern er stellt vielmehr die Observable „(Impuls) · (Ist das Teilchen am Ort x ?)“ als Ganzes dar, also einen mit einem ortsabhängigen „Gewicht“ versehenen Impuls. Es gilt

$$\int_{-\infty}^{+\infty} j_x \,\mathrm{d}x = p/m. \tag{36}$$

Der Erwartungswert des Stromoperators im Zustand $|\Phi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle j_x\rangle = \langle\Phi \mid j_x \Phi\rangle &= \frac{1}{2m}\left(\langle\Phi \mid u_x\rangle \langle u_x \mid p\,\Phi\rangle + \langle\Phi \mid p\, u_x\rangle\langle u_x \mid \Phi\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\Phi^*(x)\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x} - \Phi(x)\frac{\mathrm{d}\Phi^*}{\mathrm{d}x}\right)\end{aligned} \tag{37}$$

ist formal derselbe Ausdruck, den wir für das SCHRÖDINGERsche Materiefeld gewonnen haben [Gl. (1.4–5)], aber jetzt gebildet mit der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(x)$. *Die dort abgeleiteten Grenzbedingungen übertragen sich also auf* $\Phi(x)$.

Die Ergebnisse (34) und (35) lassen sich nach § 6 sofort ins Dreidimensionale erweitern. Im Magnetfeld tritt anstelle von $\vec{p}/m$ die Geschwindigkeit $\vec{v}$ [vgl. auch Gl. (1.4–11)].

Aufg. 89: Man berechne den Kommutator $[x, j_x]$.

§ 4. Impulsdarstellung eindimensionaler Probleme

Die im § 1 angestellten Überlegungen lassen sich mutatis mutandis für die Impulsdarstellung durchführen:

Aus der Gleichung

$$[\mathscr{F}, p] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial x} \tag{38}$$

folgt, daß auch der Impulsoperator p für die betrachteten eindimensionalen Probleme vollständig ist. Die Impulseigenvektoren $|u_p\rangle$, definiert durch

$$p\,|u_p\rangle = p\,|u_p\rangle, \tag{39}$$

bilden also ein vollständiges Basissystem. Der unitäre Operator

$$\mathscr{S}(p_0) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0 x} \quad (p_0 = \text{beliebige, reelle Zahl}) \tag{40}$$

repräsentiert eine Translation um p_0 im Impulsraum,

$$\mathscr{S}(p_0)\,|u_p\rangle = |u_{p+p_0}\rangle. \tag{41}$$

Hieraus ersieht man noch einmal, daß die Impulseigenwerte p kontinuierlich zwischen $-\infty$ und $+\infty$ liegen. Die durch

$$\langle u_p \mid u_{p'}\rangle = \delta(p - p') \tag{42}$$

orthonormierten Eigenvektoren $|u_p\rangle$ haben die Dimension (Impuls)$^{-1/2}$.

Die Komponenten

$$\Phi(p) = \langle u_p \mid \Phi \rangle \tag{43}$$

des Zustandsvektors $|\Phi\rangle$ stellen die Wahrscheinlichkeitsamplituden für eine Impulsmessung dar,

$$w_{p \ldots p+\mathrm{d}p} = |\Phi(p)|^2 \, \mathrm{d}p \tag{44}$$

ist die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen im Zustand $|\Phi\rangle$ einen Impuls im Intervall $p \ldots p + \mathrm{d}p$ besitzt ($\|\Phi\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi(p)|^2 \, \mathrm{d}p = 1$).

Die Wirkung des *Ortsoperators* in der Impulsdarstellung ergibt sich aus dem infinitesimalen Impuls-Translationsoperator $\mathscr{S}(\delta p_0) = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} x \, \delta p_0$ zu

$$\boxed{x \, |u_p\rangle = + \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}\,|u_p\rangle}{\mathrm{d}p}}\,. \tag{45}$$

Hieraus folgt für $\langle u_p \mid x \, \varphi\rangle = x \, \varphi(p)$

$$\boxed{x \, \varphi(p) = - \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}\varphi(p)}{\mathrm{d}p}}\,. \tag{46}$$

Im Gegensatz zur Wirkung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung [Gl. (16) und (18)] sind also die Vorzeichen gerade vertauscht.

Schließlich seien die *Eigenfunktionen* von Ort und Impuls in den beiden Darstellungen zusammengestellt:

	Eigenfunktion des Ortsoperators x $x\,|u_x\rangle = x\,|u_x\rangle$	Eigenfunktion des Impulsoperators p $p\,|u_p\rangle = p\,|u_p\rangle$
in Orts($\bar{x}$)-Darstellung	$\langle u_{\bar{x}} \mid u_x\rangle \equiv u_x(\bar{x}) = \delta(\bar{x} - x)$	$\langle u_{\bar{x}} \mid u_p\rangle \equiv u_p(\bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\bar{x}p}$
in Impuls($\bar{p}$)-Darstellung	$\langle u_{\bar{p}} \mid u_x\rangle \equiv u_x(\bar{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\bar{p}x}$	$\langle u_{\bar{p}} \mid u_p\rangle \equiv u_p(\bar{p}) = \delta(\bar{p} - p)$

(47)

Der Zusammenhang zwischen den Komponenten von $|\Phi\rangle$ in der Orts- und Impulsdarstellung

$$\Phi(x) \leftrightarrow \Phi(p)\ ^{1)}$$

ist nichts anderes als eine FOURIER-Transformation, die man im Kalkül des unitären Raumes einfach durch Einschieben von „Zwischenzuständen" erhält,

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \langle u_x \mid \Phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle u_x \mid u_p\rangle \langle u_p \mid \Phi\rangle \, \mathrm{d}p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp} \, \Phi(p) \, \mathrm{d}p\,, \\ \Phi(p) &= \langle u_p \mid \Phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle u_p \mid u_x\rangle \langle u_x \mid \Phi\rangle \, \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp} \, \Phi(x) \, \mathrm{d}x\,. \end{aligned} \tag{48}$$

[1]) $\Phi(x)$ und $\Phi(p)$ sind natürlich verschiedene Funktionen!

§ 5. Der Hamilton-Operator in der Impulsdarstellung, Beispiel: Teilchen unter dem Einfluß einer konstanten Kraft

In der Impulsdarstellung ist die kinetische Energie multiplikativ, so daß man nach Gl. (2.2–27) für den HAMILTON-Operator erhält

$$\boxed{\mathscr{H}\,\varphi(p) = \frac{p^2}{2\,m}\,\varphi(p) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} V(p, p')\,\varphi(p')\,\mathrm{d}p'} \,. \tag{49}$$

Dabei sind

$$V(p, p') = \langle u_p |\, \mathscr{V}(x)\, u_{p'} \rangle = \frac{1}{2\,\pi\,\hbar} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} V(x)\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p-p')x}\, \mathrm{d}x$$

die Matrixelemente des Potentials in der Impulsdarstellung. Berücksichtigt man, daß nach Gl. (46) der Ort in der p-Darstellung $-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$ lautet, so kann man an Stelle von Gl. (49) auch schreiben

$$\boxed{\mathscr{H}\,\varphi(p) = \left\{\frac{p^2}{2\,m} + V\left(x = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)\right\}\varphi(p)} \,. \tag{49a}$$

Als *Beispiel* eines Energieeigenwertproblems in der Impulsdarstellung behandeln wir ein Teilchen, das unter dem Einfluß einer konstanten Kraft $\mathscr{K} = c\,\mathbb{1}$, d. h. $\mathscr{V} = -c\,x$ steht. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\left(\frac{p^2}{2\,m} + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,c\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right) u_E(p) = E\,u_E(p),$$

oder

$$\frac{\mathrm{d}u_E}{\mathrm{d}p} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar c}\left(E - \frac{p^2}{2\,m}\right) u_E .$$

Die Lösung

$$u_E(p) = C \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar c}\, p\left(E - \frac{p^2}{6\,m}\right)\right\}$$

ergibt im Normierungsintegral

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_{E'}^{*}(p)\, u_E(p)\,\mathrm{d}p = |C|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar c}(E-E')p}\,\mathrm{d}p = |C|^2\, 2\pi\hbar c\,\delta(E - E').$$

Die möglichen Energieeigenwerte sind kontinuierlich (auch in der klassischen Behandlung gibt es keine gebundenen Zustände). Die orthonormierten Eigenfunktionen lauten

$$u_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar c}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar c}\, p\left(E - \frac{p^2}{6\,m}\right)\right\} . \tag{50}$$

Die Behandlung dieses Eigenwertproblems in der x-Darstellung führt auf eine nicht elementare Differentialgleichung. Ihre Lösung $u_E(x)$ erhält man aus (50) durch FOURIER-Transformation. Man gelangt dabei auf Zylinderfunktionen mit dem Index $^1/_3$.

Im Prinzip ist natürlich keine Darstellung des unitären Raumes vor einer anderen ausgezeichnet. Es ist eine Frage der Zweckmäßigkeit, in welcher Darstellung man eine Rechnung ausführen will.

Aufg. 90: Wie lauten die Eigenfunktionen der kinetischen Energie in der Impulsdarstellung?

Aufg. 91: Ein Teilchen befinde sich in einem Potential $\mathscr{V} = -\hat{V}\ \delta(x)$. Man untersuche das Eigenwertproblem von $\mathscr{H}$ in der Impulsdarstellung.

§ 6. Orts- und Impulsdarstellung von Systemen mit mehreren äußeren Freiheitsgraden

Für die kartesischen Orts- und Impulskoordinaten x_i, p_i eines Teilchens im dreidimensionalen Raum ($i = 1, 2, 3$) oder auch mehrerer Teilchen ($i = 1, \ldots, 3N$) gelten ebenfalls die Vertauschungsrelationen (3.2–8 bis 10). Besitzen die Teilchen keine inneren Freiheitsgrade, wie den Spin, so sind alle ihre Observablen $\mathscr{F}$ Funktionen der Operatoren x_i, p_i. Aus der Operatorgleichung (3.2–17) folgt damit, daß alle Observablen, die mit den x_i vertauschbar sind, unabhängig von den Impulsoperatoren p_i sein müssen $\left(\frac{\partial \mathscr{F}}{\partial p_i} = \mathcal{O}\right)$. Es sind also nur Funktionen $\mathscr{F}(x_1, x_2, \ldots, x_{3N})$ mit den x_i vertauschbar. Alle kartesischen Ortsoperatoren x_i bilden daher einen vollständigen Satz verträglicher Observabler (Kap. 3. 4), ihre gemeinsamen Eigenvektoren spannen den unitären Raum $\mathfrak{U}$ des N-Teilchenproblems auf.[1])

Durch völlig analoge Überlegungen folgt aus Gl. (3.2–18), daß auch die Gesamtheit aller kartesischen Impulsoperatoren p_i einen (anderen) vollständigen Satz verträglicher Observabler bildet. Mit ihren Eigenvektoren kann man ebenfalls den unitären Raum aufspannen.

Weil alle Operatoren x_i, p_k mit verschiedenen Indizes vertauschbar sind, können wir nach 3.4 § 3 den unitären Raum als Produktraum

$$\mathfrak{U} = \mathfrak{U}_1 \times \mathfrak{U}_2 \times \cdots \mathfrak{U}_i \times \cdots \mathfrak{U}_{3N} \tag{51}$$

aufbauen. Die einzelnen unitären Räume $\mathfrak{U}_i$ beschreiben eindimensionale Probleme in der i-Achse. Die Struktur ist uns aus den vorangehenden Untersuchungen eindimensionaler Probleme hinlänglich bekannt: Der Raum $\mathfrak{U}_i$ wird aufgespannt von den Eigenvektoren $|u_{x_i}\rangle$ von x_i (oder auch von den Impulseigen-

[1]) Sind die N Teilchen insbesondere alle gleich, so ergibt ihre Ununterscheidbarkeit eine Einschränkung der möglichen Zustandsvektoren (Kap. 4.5).

vektoren $|u_{p_i}\rangle$); die Eigenwerte x_i können (ebenso wie die Eigenwerte p_i) kontinuierlich alle reellen Werte zwischen $-\infty$ und $+\infty$ annehmen. Es gilt

$$\langle u_{x_i} | u'_{x_i}\rangle = \delta(x_i - x'_i), \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} |u_{x_i}\rangle \langle u_{x_i}| \, dx_i = I \text{ in } \mathfrak{U}_i. \tag{52}$$

Der Produktraum $\mathfrak{U}$ wird nach 2.4 § 1 aufgespannt durch die direkten Produkte

$$|u_{x_1} u_{x_2} \dots u_{x_{3N}}\rangle = |u_{x_1}\rangle |u_{x_2}\rangle \dots |u_{x_{3N}}\rangle = \prod_{i=1}^{3N} |u_{x_i}\rangle. \tag{53}$$

Sie sind die gemeinsamen Eigenvektoren aller Operatoren x_i in $\mathfrak{U}$. Wegen Gl. (52) sind diese Vektoren auf die δ-Funktion normiert,

$$\langle u_{x_1} u_{x_2} \dots u_{x_{3N}} | u_{x'_1} u_{x'_2} \dots u_{x'_{3N}}\rangle = \delta(x_1 - x'_1)\, \delta(x_2 - x'_2) \dots \delta(x_{3N} - x'_{3N}), \tag{54}$$

und vollständig,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} |u_{x_1} \dots u_{x_{3N}}\rangle \langle u_{x_1} \dots u_{x_{3N}}| \, dx_1 \dots dx_{3N} = I \quad \text{in } \mathfrak{U}. \tag{55}$$

Für die Ortseigenvektoren *eines* Teilchen im Dreidimensionalen schreiben wir zusammenfassend

$$\boxed{|u_{x_1} u_{x_2} u_{x_3}\rangle = |u_{\mathfrak{r}}\rangle}, \tag{56}$$

wobei also gilt

$$\langle u_{\mathfrak{r}} | u_{\mathfrak{r}'}\rangle = \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}') \quad \text{und} \quad \int |u_{\mathfrak{r}}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}}| \, d^3x = I. \tag{57}$$

Mit dieser Schreibweise erhalten wir für N Teilchen

$$|u_{x_1} \dots u_{x_{3N}}\rangle = \prod_{\nu=1}^{N} |u_{\mathfrak{r}_\nu}\rangle. \tag{58}$$

Projizieren wir den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ von N Teilchen auf die Vektoren (58) (*Ortsdarstellung*), so ist nach den allgemeinen Überlegungen von 3.3 § 5

$$|\langle u_{\mathfrak{r}_1} \dots u_{\mathfrak{r}_N} | \Phi\rangle|^2 \, d^3x_1 \dots d^3x_N = |\Phi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_N)|^2 \, d^3x_1 \dots d^3x_N \tag{59}$$

die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen 1 am Ort $\mathfrak{r}_1$ im Volumenelement d^3x_1, das Teilchen 2 am Ort $\mathfrak{r}_2$ im Volumenelement d^3x_2 usw. anzutreffen.

Für die Wirkung des *Impulsoperators* $\vec{p}_\nu$ des ν-ten Teilchens in der Ortsdarstellung $\langle u_{\mathfrak{r}_1} \dots u_{\mathfrak{r}_N} | \varphi\rangle = \varphi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_N)$ erhalten wir analog zu Gl. (18)

$$\vec{p}_\nu \, \varphi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_N) = \frac{\hbar}{i} \nabla_\nu \varphi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_N). \tag{60}$$

Damit ergibt sich für den HAMILTON-Operator mehrerer wechselwirkender Teilchen,

$$\mathscr{H} = \sum_{\nu=1}^{N} \frac{1}{2m_\nu} \vec{p}_\nu^{\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \tag{61}$$

in der Ortsdarstellung die Eigenwertgleichung

$$\boxed{\left(-\sum_{\nu=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_\nu}\Delta_\nu + V(\mathfrak{r}_1,\ldots,\mathfrak{r}_N)\right)u_E(\mathfrak{r}_1,\ldots,\mathfrak{r}_N) = E\,u_E(\mathfrak{r}_1,\ldots,\mathfrak{r}_N)}\,. \tag{62}$$

Die SCHRÖDINGER-*Gleichung* (3.5–43) *für die Wahrscheinlichkeitsamplitude* $\Phi(\mathfrak{r}_1,\ldots,\mathfrak{r}_N,t)$ *von N Teilchen* nimmt die Gestalt

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \left(-\sum_{\nu=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_\nu}\Delta_\nu + V(\mathfrak{r}_1,\ldots,\mathfrak{r}_N)\right)\Phi} \tag{63}$$

an.

An Stelle der Ortseigenvektoren (53) lassen sich natürlich auch die Impulseigenvektoren

$$|u_{p_1}\ldots u_{p_{3N}}\rangle = \prod_{i=1}^{3N}|u_{p_i}\rangle \tag{64}$$

verwenden, um den unitären Raum aufzubauen (*Impulsdarstellung*). Sie sind in gleicher Weise orthonormiert und vollständig. Für das Skalarprodukt des Impulseigenvektors *eines* Teilchens,

$$|u_{\mathfrak{p}}\rangle = |u_{p_1}u_{p_2}u_{p_3}\rangle, \tag{65}$$

mit $|u_{\mathfrak{r}}\rangle$ ergibt sich nach Gl. (25) und (2.4–3)

$$\langle u_{\mathfrak{r}}\,|\,u_{\mathfrak{p}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^{\,3}}\,e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathfrak{r}\mathfrak{p}}\,. \tag{66}$$

Aufg. 92: Eine *Ortstransformation* $\vec{x} \to \vec{x}'$ wird durch einen unitären Operator $\mathcal{D}$ der Eigenschaft

$$\mathcal{D}\,\vec{x}\,\mathcal{D}^{-1} = \vec{x}'(\vec{x})$$

beschrieben (Kap. 3.6).

a) Welche Wirkung hat $\mathcal{D}$ in der Ortsdarstellung?

b) Wie lautet in der Ortsdarstellung die Invarianz von $\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} + \mathcal{V}(\vec{x})$ gegenüber der Ortstransformation $\mathcal{D}$?

Zweites Kapitel

Der harmonische Oszillator

In der geschichtlichen Entwicklung der Quantentheorie spielte die Behandlung des harmonischen Oszillators eine bedeutende Rolle (Kap. 1.1). Seine wichtigste Anwendung findet er heute einerseits in der Theorie der Molekül- und Kristallschwingungen, andererseits bildet er durch seine enge Beziehung mit elektromagnetischen Wellen und Materiewellen eine gewisse Vorstufe für das Verständnis der Quantenfeldtheorie. Gerade im Hinblick darauf werden wir das Eigenwertproblem des HAMILTON-Operators eines Oszillators zu-

nächst nicht in einer speziellen Darstellung angehen, sondern es aus der Struktur der Vertauschungsrelationen lösen — ähnlich der Behandlung, die wir beim Orts- und Impulsoperator durchführten.

§ 1. Der Operator $\mathfrak{b}$

Die rücktreibende Kraft $\mathcal{K} = -k\,x$ des (eindimensionalen) harmonischen Oszillators führt zur potentiellen Energie

$$\mathcal{V}(x) = \frac{k}{2}\,x^2 = \frac{m\,\omega^2}{2}\,x^2, \tag{1}$$

wobei $\omega = \sqrt{k/m}$ die Schwingungsfrequenz bedeutet. Es ist die Aufgabe, die Eigenwerte und Eigenvektoren des HAMILTON-Operators

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2\,m} + \frac{m\,\omega^2}{2}\,x^2 \tag{2}$$

zu bestimmen. Wir definieren dazu den (nicht-HERMITEschen) Operator

$$\mathfrak{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\,\omega}\,x + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\,\omega}}\,p\right). \tag{3}$$

Der dazu adjungierte Operator lautet wegen der HERMITEizität von x und p

$$\mathfrak{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\,\omega}\,x - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\,\omega}}\,p\right). \tag{4}$$

Durch Addition bzw. Subtraktion erhalten wir die Auflösung nach x und p

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\mathfrak{b} + \mathfrak{b}^\dagger),\\ p &= \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(\mathfrak{b} - \mathfrak{b}^\dagger). \end{aligned} \tag{5}$$

Die Vertauschungsrelationen zwischen x und p finden ihren Niederschlag in denen zwischen $\mathfrak{b}$ und $\mathfrak{b}^\dagger$. Aus

$$p\,x - x\,p = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\{(\mathfrak{b} - \mathfrak{b}^\dagger)(\mathfrak{b} + \mathfrak{b}^\dagger) - (\mathfrak{b} + \mathfrak{b}^\dagger)(\mathfrak{b} - \mathfrak{b}^\dagger)\} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathbf{1}$$

folgt

$$\boxed{[\mathfrak{b}, \mathfrak{b}^\dagger] = \mathbf{1}}\,. \tag{6}$$

Der HAMILTON-Operator (2) wird durch Gl. (5) eine Funktion von $\mathfrak{b}$ und $\mathfrak{b}^\dagger$,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{\hbar\,\omega}{4}\{-(\mathfrak{b} - \mathfrak{b}^\dagger)^2 + (\mathfrak{b} + \mathfrak{b}^\dagger)^2\}\\ &= \frac{\hbar\,\omega}{2}\{\mathfrak{b}\,\mathfrak{b}^\dagger + \mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b}\}, \end{aligned}$$

wofür wir wegen der Vertauschungsrelation (6) auch schreiben können

$$\boxed{\mathcal{H} = \hbar\omega\left(\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b} + \frac{1}{2}\,\mathbf{1}\right)}\,. \tag{7}$$

Wenn es gelingt, den HERMITEschen Operator

$$\boxed{\mathfrak{n} = \mathfrak{b}^\dagger \mathfrak{b}} \tag{8}$$

unter Berücksichtigung der Vertauschungsrelation (6) zu diagonalisieren, so ist auch das Eigenwertproblem von $\mathscr{H}$ gelöst. Wir leiten dazu zunächst noch einige Vertauschungsrelationen zwischen $\mathfrak{n}$ und $\mathfrak{b}$ bzw. $\mathfrak{b}^\dagger$ ab. Aus Gl. (6) ergibt sich

$$\mathfrak{b}\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}\,\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b} = (\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b} + 1)\,\mathfrak{b} = \mathfrak{n}\,\mathfrak{b} + \mathfrak{b}$$

und

$$\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b} = \mathfrak{b}^\dagger\,(\mathfrak{b}\,\mathfrak{b}^\dagger - 1) = \mathfrak{n}\,\mathfrak{b}^\dagger - \mathfrak{b}^\dagger\,,$$

also

$$[\mathfrak{b}, \mathfrak{n}] = \mathfrak{b} \quad \text{und} \quad [\mathfrak{b}^\dagger, \mathfrak{n}] = -\,\mathfrak{b}^\dagger\,. \tag{9}$$

Hieraus folgt

$$\mathfrak{b}^2\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}\,\mathfrak{b}\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}\,(\mathfrak{n} + 1)\,\mathfrak{b} = (\mathfrak{n} + 1)\,\mathfrak{b}^2 + \mathfrak{b}^2 = \mathfrak{n}\,\mathfrak{b}^2 + 2\,\mathfrak{b}^2$$

und

$$\mathfrak{b}^{\dagger 2}\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{n} = \mathfrak{b}^\dagger\,(\mathfrak{n} - 1)\,\mathfrak{b}^\dagger = (\mathfrak{n} - 1)\,\mathfrak{b}^{\dagger 2} - \mathfrak{b}^{\dagger 2} = \mathfrak{n}\,\mathfrak{b}^{\dagger 2} - 2\,\mathfrak{b}^{\dagger 2}$$

usw. für beliebige positive Potenzen,

$$\boxed{[\mathfrak{b}^q, \mathfrak{n}] = q\,\mathfrak{b}^q, \quad [\mathfrak{b}^{\dagger q}, \mathfrak{n}] = -\,q\,\mathfrak{b}^{\dagger q}} \quad (q = \text{pos. ganz}). \tag{10}$$

Aufg. 93: Man berechne $\mathring{\mathfrak{b}}$. Wie lautet im HEISENBERG-Bild $\mathfrak{b}^H(t)$?

§ 2. Das Eigenwertproblem von $\mathscr{H}$ bzw. $\mathfrak{n} = \mathfrak{b}^\dagger\,\mathfrak{b}$

Sind n die Eigenwerte des Operators $\mathfrak{n}$ und $|u_n\rangle$ die zugehörigen Eigenvektoren,

$$\mathfrak{n}\,|u_n\rangle = n\,|u_n\rangle, \tag{11}$$

so liefert die Anwendung der ersten Operatorgleichung (10) auf $|u_n\rangle$

$$\mathfrak{n}\,|\mathfrak{b}^q u_n\rangle = (n - q)\,|\mathfrak{b}^q u_n\rangle, \tag{12}$$

d. h., $|\mathfrak{b}^q u_n\rangle$ ist ebenfalls Eigenvektor von $\mathfrak{n}$, aber zum Eigenwert $n - q$,

$$|\mathfrak{b}^q u_n\rangle = c(n, q)\,|u_{n-q}\rangle. \tag{13}$$

$c(n, q)$ ist ein aus der Normierung zu bestimmender Faktor (Aufg. 94). Wendet man die zweite der Operatorgleichungen (10) auf $|u_n\rangle$ an, so erhält man

$$\mathfrak{n}|\mathfrak{b}^{\dagger q} u_n\rangle = (n + q)\,|\mathfrak{b}^{\dagger q} u_n\rangle, \tag{14}$$

d. h., $|\mathfrak{b}^{\dagger q} u_n\rangle$ ist Eigenvektor von $\mathfrak{n}$ mit dem Eigenwert $n + q$,

$$|\mathfrak{b}^{\dagger q} u_n\rangle = c'(n, q)\,|u_{n+q}\rangle. \tag{15}$$

$c'(n, q)$ bestimmt sich wieder durch Normierung.

Wir erhalten damit für den Operator $\mathscr{n}$ die Reihe von Eigenwerten mit den zugehörigen — noch nicht normierten — Eigenvektoren

$$\left.\begin{array}{ll}\text{Eigenwert:} & \ldots,\ n+q,\ \ldots,\ n+1,\quad n,\quad n-1,\ldots,n-q,\ldots \\ \text{Eigenvektor:} & \ldots,\ |\mathscr{b}^{\dagger q} u_n\rangle,\ \ldots,\ |\mathscr{b}^{\dagger} u_n\rangle,\ |u_n\rangle,\ |\mathscr{b}\, u_n\rangle,\ \ldots,\ |\mathscr{b}^{q} u_n\rangle,\ \ldots\end{array}\right\} \qquad (16)$$

Der Operator $\mathscr{b}^{\dagger}$ erzeugt also einen Eigenvektor mit einem um eins größeren Eigenwert, während durch $\mathscr{b}$ ein Eigenvektor mit einem um eins kleineren Eigenwert entsteht.

Die Länge des Vektors $|\mathscr{b}^{q+1} u_n\rangle$ steht mit jener von $|\mathscr{b}^{q} u_n\rangle$ in dem Zusammenhang

$$\|\mathscr{b}^{q+1} u_n\|^2 = \langle \mathscr{b}^{q+1} u_n | \mathscr{b}^{q+1} u_n\rangle = \langle \mathscr{b}^{q} u_n | \mathscr{n}\, \mathscr{b}^{q} u_n\rangle = (n-q)\, \|\mathscr{b}^{q} u_n\|^2. \qquad (17)$$

Weil die Länge eines Vektors stets positiv sein muß, darf $n - q$ nicht negativ werden. Da q eine positive, ganze Zahl ist, müssen die Eigenwerte n *positiv ganz* sein

$$n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (18)$$

In diesem Fall verschwindet nämlich für $q_{\max} = n$ die Länge $\|\mathscr{b}^{n+1} u_n\|$, d. h. $|\mathscr{b}^{n+1} u_n\rangle = 0$. Damit ist aber auch das Verschwinden aller höheren Potenzen gegeben, die Reihe (16) bricht nach rechts ab. Die Eigenwerte (18) und nur diese gewährleisten, daß die Länge der Eigenvektoren nicht negativ wird.

Die Eigenwerte der Oszillatorenergie

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \qquad (19)$$

sind äquidistant (Fig. 75). Den Abstand $\hbar\omega$ zweier benachbarter Energieterme nennt man ein *Schwingungsquant*. Befindet sich der Oszillator im Energiezustand E_n, so sagt man dafür auch: Es sind n Schwingungsquanten angeregt; $\mathscr{n}$ ist der Operator der *Anzahl* der Schwingungsquanten. Ihre unmittelbare Anwendung findet die Energiebeziehung bei den Schwingungen zweiatomiger Moleküle, deren Schwingungsspektren dadurch erklärt werden. Die Schwingungen mehratomiger Moleküle und die Gitterschwingungen eines Kristalls lassen sich auf eine Reihe von „Normalschwingungen" mit verschiedenen Oszillatorfrequenzen ω zurückführen, d. h., ihr Hamilton-Operator besteht aus einer Summe von Operatoren der Gestalt (7). Die Schwingungsquanten einer bestimmten Frequenz ω bezeichnet man dann auch als „*Phononen*" dieser Frequenz. Berechnet man die bei einer bestimmten Temperatur (3.7 § 2) sich einstellende, mittlere Schwingungsenergie, so gelangt man zur Theorie der spezifischen Wärmen (Debye, Einstein) (vgl. 1.1 § 1 b).

Im Gegensatz zur PLANCKschen Hypothese ist die tiefste Oszillatorenergie nicht Null, sondern $\hbar\omega/2$. Die Existenz dieser *Nullpunktsenergie* ist schon aus der Unschärferelation ersichtlich. Nach der klassischen Mechanik müßte nämlich bei $E = 0$ sowohl x als auch p verschwinden, was eine gleichzeitige, scharfe Angabe von kanonischen Größen bedeuten würde. Daher ist die Energie $E = 0$ nicht möglich. Dieses Argument gilt übrigens für eine beliebige Potentialmulde, weil im Minimum x und p stets genau definiert wären: *Gebundene Zustände müssen eine Nullpunktsenergie besitzen.*

Der Operator ℓ ist „*Vernichtungsoperator*" eines Schwingungsquants (Phonons),

$$\ell\,|u_n\rangle = c\,|u_{n-1}\rangle.$$

Aus der Normierung

$$1 = \langle u_{n-1}\,|\,u_{n-1}\rangle = \frac{1}{|c|^2}\langle \ell\,u_n\,|\,\ell\,u_n\rangle = \frac{1}{|c|^2}\langle u_n\,|\,n\,u_n\rangle = \frac{n}{|c|^2}$$

folgt

$$\boxed{\ell\,|u_n\rangle = \sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle}. \tag{20}$$

Der Operator $\ell^\dagger$ hingegen ist „*Erzeugungsoperator*" eines Schwingungsquants,

$$\ell^\dagger\,|u_n\rangle = c'\,|u_{n+1}\rangle.$$

Mit

$$1 = \langle u_{n+1}\,|\,u_{n+1}\rangle = \frac{1}{|c'|^2}\langle \ell^\dagger\,u_n\,|\,\ell^\dagger\,u_n\rangle = \frac{1}{|c'|^2}\langle u_n\,|\,\ell\,\ell^\dagger\,u_n\rangle$$

$$= \frac{1}{|c'|^2}\langle u_n\,|(n + 1)\,u_n\rangle = \frac{n+1}{|c'|^2}$$

erhält man

$$\boxed{\ell^\dagger\,|u_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle}. \tag{21}$$

Die Eigenvektoren $|u_n\rangle$ lassen sich aus dem tiefsten Energiezustand $|u_0\rangle$, definiert durch

$$\ell\,|u_0\rangle = 0, \tag{22}$$

durch Anwendung von $\ell^{\dagger n}$ aufbauen. Ist der tiefste Zustand normiert, $||u_0|| = 1$, so ergeben sich die normierten Eigenzustände $|u_n\rangle$ bei n-maliger Benutzung von Gl. (21) zu

$$\boxed{|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,|\ell^{\dagger n}u_0\rangle}. \tag{23}$$

Die Wirkung des Orts- bzw. Impulsoperators auf die Energiezustände erhalten wir nach Gl. (5),

$$\left.\begin{aligned} x\,|u_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle + \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle\right), \\ p\,|u_n\rangle &= \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle - \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle\right). \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

Da der HAMILTON-Operator (2) vollständig ist (Aufg. 95), bilden die Vektoren $|u_n\rangle$ einen vollständigen Satz orthonormierter Basisvektoren,

$$\langle u_n \,|\, u_{n'}\rangle = \delta_{nn'}, \qquad \sum_{n=0}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n| = 1\,. \tag{25}$$

Jeden beliebigen Oszillatorzustand $|\Phi\rangle$ erhält man also durch Entwicklung nach den Energieeigenvektoren $|u_n\rangle$,

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |u_n\rangle\,\Phi_n \quad \text{mit} \quad \Phi_n = \langle u_n \,|\, \Phi\rangle\,. \tag{26}$$

Aufg. 94: Wie lauten die Normierungskoeffizienten $c(n, q)$ und $c'(n, q)$ in Gl. (13) und (15)?

Aufg. 95: Warum sind die Energiezustände des Oszillators vollständig?

Aufg. 96: Zur Zeit $t = 0$ befinde sich ein Oszillator im Grundzustand E_0. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß er zur Zeit t im angeregten Zustand E_n ist, wenn eine zeitabhängige äußere Kraft auf ihn wirkt?

Aufg. 97: Man bestimme die Energieeigenwerte eines geladenen Teilchens in einem homogenen Magnetfeld.

§ 3. Matrixelemente in der Energiedarstellung

Die Gl. (20) liefert für die Matrixelemente $b_{nn'} = \langle u_n \,|\, b\,u_{n'}\rangle$ unmittelbar

$$b_{nn'} = \sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & & 0 \\ & & 0 & \sqrt{3} & \\ & 0 & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{27}$$

(Zeilen: $n\downarrow$, Spalten: $\rightarrow n'$)

und entsprechend

$$b^{\dagger}_{nn'} = \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1} = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & & & 0 \\ & \sqrt{2} & 0 & & \\ & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{28}$$

$$n_{nn'} = \delta_{nn'} = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ & 1 & & & 0 \\ & & 2 & & \\ & 0 & & 3 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}. \tag{29}$$

Alle in § 1 und § 2 angegebenen Operatorgleichungen können als Gleichungen zwischen unendlichen Matrizen geschrieben werden, z. B.

$$x_{nn'} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{30}$$

$$p_{nn'} = \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\sqrt{n'}\,\delta_{n,n'-1} - \sqrt{n'+1}\,\delta_{n,n'+1}\right)$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & 0 \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \\ & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ & & -\sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{31}$$

Aufg. 98: Man verifiziere Energieeigenwertgleichung sowie die Vertauschungsrelation zwischen x und p direkt in den Matrizen der Energiedarstellung.

Aufg. 99: Wie groß sind die Orts- und Impulsunschärfen eines Oszillators, der sich in einem Energieeigenzustand befindet?

§ 4. Oszillatoreigenfunktionen in der Ortsdarstellung

Der Operator $\mathscr{b}$ bewirkt in der Ortsdarstellung, daß einer Funktion $\langle u_x \mid \varphi\rangle = \varphi(x)$ die Funktion

$$\mathscr{b}\,\varphi(x) = \langle u_x \mid \mathscr{b}\,\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\varphi(x)$$

zugeordnet wird. Führen wir die dimensionslose Größe

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \tag{32}$$

ein, so erhalten wir in dieser Variablen

$$\mathscr{b}\,\varphi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\varphi(\xi), \tag{33}$$

und entsprechend

$$\mathscr{b}^{\dagger}\,\varphi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\varphi(\xi). \tag{34}$$

Aus der Definitionsgleichung (22) für den *Energiegrundzustand* folgt in der Ortsdarstellung $\langle u_x \mid u_0\rangle = u_0(x)$ die Differentialgleichung

$$\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)u_0(\xi) = 0. \tag{35}$$

Durch Trennung der Variablen erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}u_0}{u_0} = -\,\xi\,\mathrm{d}\xi$$

oder

$$u_0(\xi) = C_0\, e^{-\xi^2/2}. \tag{36}$$

Die Normierung

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_0(x)|^2\, dx = |C_0|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi = |C_0|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}$$

liefert

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}. \tag{37}$$

Die *angeregten Energiezustände* $u_n(\xi)$ ergeben sich durch Anwendung von $\frac{1}{\sqrt{n!}}\, \mathscr{E}^{\dagger n}$ auf den Grundzustand, d. h.

$$u_n(\xi) = \frac{C_0}{\sqrt{2^n\, n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}. \tag{38}$$

Diese Gleichung läßt sich noch etwas umformen, wenn man berücksichtigt, daß für eine beliebige Funktion $\varphi(\xi)$ die Identitäten

$$\begin{aligned} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \varphi(\xi) &= -\, e^{+\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} [e^{-\xi^2/2}\, \varphi(\xi)], \\ \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^2 \varphi(\xi) &= +\, e^{+\xi^2/2} \frac{d^2}{d\xi^2} [e^{-\xi^2/2}\, \varphi(\xi)], \\ &\vdots \\ \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \varphi(\xi) &= (-1)^n\, e^{+\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} [e^{-\xi^2/2}\, \varphi(\xi)] \end{aligned} \tag{39}$$

gelten. Mit $\varphi(\xi) = e^{-\xi^2/2}$ nimmt Gl. (38) daher die Gestalt

$$u_n(\xi) = \frac{C_0}{\sqrt{2^n\, n!}} (-1)^n\, e^{+\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

an. Nennen wir

$$H_n(\xi) = (-1)^n\, e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, \tag{40}$$

so schreiben sich die *normierten Oszillatoreigenfunktionen in der Ortsdarstellung*

$$\boxed{u_n(\xi) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\, \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}}\, H_n(\xi)\, e^{-\xi^2/2}}\,. \tag{41}$$

Die Funktionen $H_n(\xi)$ werden durch Ausdifferenzieren von Gl. (40) zu Polynomen n-ten Grades und heißen HERMITE*sche Polynome.* Man findet

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, & H_3 &= (2\xi)^3 - 6(2\xi), \\ H_1 &= 2\xi, & H_4 &= (2\xi)^4 - 12(2\xi)^2 + 12, \\ H_2 &= (2\xi)^2 - 2, & H_5 &= (2\xi)^5 - 20(2\xi)^3 + 60(2\xi), \text{ usw.} \end{aligned} \tag{42}$$

Wendet man die Gleichungen (33) und (34) auf die Eigenfunktionen $u_n(\xi)$ an, und berücksichtigt man die Gleichungen (20) und (21), so ergeben sich die Relationen

$$2\xi H_n = 2n H_{n-1} + H_{n+1}, \tag{43}$$

$$H_n' = 2n H_{n-1}. \tag{44}$$

Diese Gleichungen lassen sich natürlich auch mittels Gl. (40) verifizieren. Gl. (43) dient zur rekursiven Berechnung der Polynome. Aus (43) und (44) folgt die Differentialgleichung 2. Ordnung

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0. \tag{45}$$

Die Orthonormierung der $u_n(x)$ geht über in

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_{n'}(\xi)\, d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}\, \delta_{nn'}. \tag{46}$$

Die Eigenfunktionen $u_n(\xi)$ haben bezüglich des Nullpunktes die Symmetrieeigenschaft

$$u_n(-\xi) = (-1)^n u_n(\xi). \tag{47}$$

Für reelles ξ sind die $u_n(\xi)$ reell und haben n Nullstellen. In dem Gebiet der klassischen Oszillatorbewegung sind die $u_n(\xi)$ konkav zur ξ-Achse; außerhalb dieses Gebietes klingen die Funktionen ab, und zwar wie $\xi^n e^{-\xi^2/2}$ für $\xi \to \pm\infty$. In Fig. 75 ist der Verlauf der niedrigsten Eigenfunktionen wiedergegeben. Ihr Quadrat $u_n^2(x)$ gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an, das Teilchen an einem Ort x anzutreffen, wenn unmittelbar vorher der Energiewert E_n festgestellt wurde.

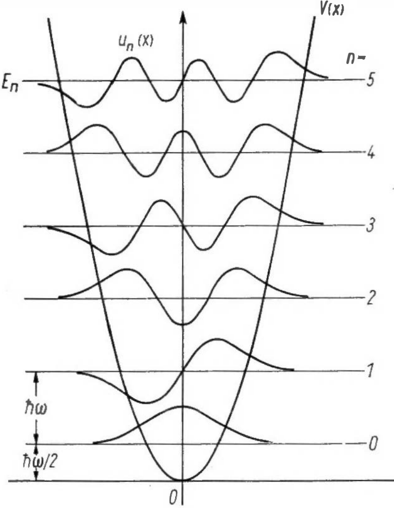


Fig. 75. Eigenwerte E_n und Eigenfunktionen $u_n(x)$ im Oszillatorpotential $V(x)$

Schreibt man den HAMILTON-Operator (2) in der Ortsdarstellung, so erhält man für $u_n(x)$ die Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right] u_n(x) = E_n u_n(x). \tag{48}$$

Eine genauere Untersuchung dieser nichtelementaren Differentialgleichung zeigt, daß sie nur für $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots$ Lösungen besitzt, die für $x \to \pm\infty$ nicht divergieren[1]). Mittels der Substitution $u_n = C_n H_n(\xi)\exp(-\xi^2/2)$ gelangt man zur Differentialgleichung (45). Wir wollen diesen Weg hier nicht

[1]) Auch auf diesem Weg ergibt also die Forderung, daß $|u_n\rangle$ ein HILBERT-Raum-Vektor ist, die Lösung des Eigenwertproblems.

weiter verfolgen, weil wir mit Hilfe der Methoden des unitären Raumes ein wesentlich eleganteres, darstellungsunabhängiges Verfahren kennengelernt haben

Der HAMILTON-Operator (2) ist — bis auf Faktoren — in x und p symmetrisch. Die Energieeigenfunktionen in der *Impulsdarstellung* haben daher dieselbe Gestalt wie in der Ortsdarstellung. Man findet

$$u_n(p) = \sqrt[4]{\frac{1}{m\omega\hbar\pi}} \frac{(-\mathrm{i})^n}{\sqrt{2^n\, n!}} H_n(\eta)\, \mathrm{e}^{-\eta^2/2} \qquad \left(\eta = \frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right). \tag{49}$$

Drittes Kapitel

Quantentheorie des Drehimpulses

§ 1. Das Eigenwertproblem des Drehimpulses

a) Vertauschungsrelationen

Die Überlegungen von 3.6 § 6 zeigten, daß die Definition des Drehimpulses $\vec{\mathscr{J}}$ auf der Isotropie des Raumes beruht und daß die Eigenschaften der Raumdrehungen auf die Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten $\mathscr{J}_x$, $\mathscr{J}_y$, $\mathscr{J}_z$ führen. Wir wollen daher bei der Behandlung des Eigenwertproblems allein von den Vertauschungsrelationen

$$\boxed{[\mathscr{J}_x, \mathscr{J}_y] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathscr{J}_z, \quad [\mathscr{J}_y, \mathscr{J}_z] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathscr{J}_x, \quad [\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_x] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \mathscr{J}_y} \tag{1}$$

Gebrauch machen und von der speziellen Realisierung durch den Bahndrehimpuls $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$ (3.2 § 3c) zunächst absehen. Man erhält damit eine Mannigfaltigkeit von Eigenvektoren, die nicht nur den Bahndrehimpuls, sondern auch den Spin und schließlich die aus mehreren Drehimpulsen zusammengesetzten Drehimpulse $\vec{\mathscr{J}} = \sum_\nu \vec{\mathscr{J}}_\nu$ (§ 7) umfaßt. Aus den Vertauschungsrelationen (1) folgt in einer zu 3.2 § 3c analogen Rechnung, daß der Operator des Drehimpulsquadrates

$$\vec{\mathscr{J}}^2 = \mathscr{J}_x^2 + \mathscr{J}_y^2 + \mathscr{J}_z^2 \tag{2}$$

mit allen Komponenten vertauschbar ist,

$$\boxed{[\vec{\mathscr{J}}^2, \mathscr{J}_i] = \mathcal{O}}\,. \tag{3}$$

Die Nichtvertauschbarkeit der Drehimpulskomponenten untereinander bedeutet, daß es nicht möglich ist, alle drei Komponenten des Drehimpulses eines quantenmechanischen Systems gleichzeitig scharf zu messen. Wegen der Vertauschbarkeit aller Komponenten mit dem Betrag des Drehimpulses ist es jedoch möglich, irgendeine Komponente des Drehimpulses — man wählt hierfür in

willkürlicher Weise im allgemeinen die z-Komponente — gemeinsam mit dem Betrag gleichzeitig zu messen. Es besteht die Aufgabe, die Eigenwerte dieser beiden Operatoren und ihr gemeinsames System von Eigenvektoren aufzusuchen. Ähnlich wie bei der Behandlung des Oszillators werden wir wieder darstellungsunabhängig vorgehen.

Für die gleichzeitige Diagonalisierung von $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ ist es zweckmäßig, an Stelle von $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ neue (nicht HERMITEsche) Operatoren

$$\mathscr{J}_\pm = \mathscr{J}_x \pm \mathrm{i}\,\mathscr{J}_y \tag{4}$$

einzuführen. $\mathscr{J}_-$ ist der zu $\mathscr{J}_+$ adjungierte Operator. Durch Auflösung der Gl. (4) nach $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ erhält man

$$\mathscr{J}_x = \frac{1}{2}(\mathscr{J}_+ + \mathscr{J}_-), \qquad \mathscr{J}_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathscr{J}_+ - \mathscr{J}_-). \tag{5}$$

Weil $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ mit $\vec{\mathscr{J}}^2$ vertauschbar sind, gilt natürlich auch für $\mathscr{J}_+$ und $\mathscr{J}_-$

$$[\vec{\mathscr{J}}^2, \mathscr{J}_\pm] = \mathcal{O}. \tag{6}$$

Für das Produkt $\mathscr{J}_+\mathscr{J}_-$ bzw. $\mathscr{J}_-\mathscr{J}_+$ liefern die Gleichungen (4) und (1)

$$\begin{aligned}\mathscr{J}_\pm\mathscr{J}_\mp &= (\mathscr{J}_x \pm \mathrm{i}\,\mathscr{J}_y)(\mathscr{J}_x \mp \mathrm{i}\,\mathscr{J}_y)\\ &= \mathscr{J}_x^2 \pm \mathrm{i}(\mathscr{J}_y\mathscr{J}_x - \mathscr{J}_x\mathscr{J}_y) + \mathscr{J}_y^2 = \mathscr{J}_x^2 + \mathscr{J}_y^2 \pm \hbar\,\mathscr{J}_z,\end{aligned}$$

d. h.

$$\mathscr{J}_\pm\mathscr{J}_\mp = \vec{\mathscr{J}}^2 - \mathscr{J}_z^2 \pm \hbar\,\mathscr{J}_z. \tag{$7_\pm$}$$

Durch Subtraktion erhalten wir für den Kommutator

$$[\mathscr{J}_+, \mathscr{J}_-] = 2\hbar\,\mathscr{J}_z, \tag{8}$$

während die Addition der beiden Gleichungen (7) für $\vec{\mathscr{J}}^2$ ergibt

$$\vec{\mathscr{J}}^2 = \frac{1}{2}(\mathscr{J}_+\mathscr{J}_- + \mathscr{J}_-\mathscr{J}_+) + \mathscr{J}_z^2. \tag{9}$$

Für die Kommutatoren $[\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_\pm]$ findet man nach Gl. (1)

$$[\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_\pm] = [\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_x] \pm \mathrm{i}[\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_y] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathscr{J}_y \pm \mathrm{i}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathscr{J}_x,$$

d. h.

$$\boxed{[\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_\pm] = \pm\hbar\,\mathscr{J}_\pm}\,. \tag{$10_\pm$}$$

Hieraus ergibt sich für

$$\mathscr{J}_z\mathscr{J}_\pm^2 = (\mathscr{J}_\pm\mathscr{J}_z \pm \hbar\,\mathscr{J}_\pm)\mathscr{J}_\pm = \mathscr{J}_\pm(\mathscr{J}_\pm\mathscr{J}_z \pm \hbar\,\mathscr{J}_\pm) \pm \hbar\,\mathscr{J}_\pm^2$$

oder

$$[\mathscr{J}_z, \mathscr{J}_\pm^2] = \pm 2\hbar\,\mathscr{J}_\pm^2.$$

Fährt man in derselben Weise fort, so erhält man für irgendwelche ganze Potenzen $\mathcal{J}_\pm^n$

$$[\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_\pm^n] = \pm\, n\hbar\, \mathcal{J}_\pm^n \qquad (n = 0, 1, \ldots). \tag{$11_\pm$}$$

b) Die Eigenwerte von $\vec{\mathcal{J}}^2$ und $\mathcal{J}_z$

Die gemeinsamen Eigenvektoren von $\vec{\mathcal{J}}^2$ und $\mathcal{J}_z$ genügen den Gleichungen

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}^2 |u\rangle &= a\hbar^2\, |u\rangle, \\ \mathcal{J}_z |u\rangle &= M\hbar\, |u\rangle. \end{aligned} \tag{12}$$

Es sind die dimensionslosen Zahlen a und M zu berechnen.

Wenden wir die Gl. ($10_\pm$) auf die Eigenvektoren $|u\rangle$ an,

$$\mathcal{J}_z \mathcal{J}_\pm\, |u\rangle = \mathcal{J}_\pm\, \mathcal{J}_z |u\rangle \pm \hbar\, \mathcal{J}_\pm |u\rangle = (M \pm 1)\, \hbar\, \mathcal{J}_\pm |u\rangle, \tag{$13_\pm$}$$

so sieht man, daß $|\mathcal{J}_\pm u\rangle$ ebenfalls Eigenvektoren von $\mathcal{J}_z$ sind, aber zum Eigenwert $(M \pm 1)\, \hbar$. Außerdem ist $|\mathcal{J}_\pm u\rangle$ auch Eigenvektor von $\vec{\mathcal{J}}^2$ zum Eigenwert $a\hbar^2$, weil nach Gl. (6) gilt

$$\vec{\mathcal{J}}^2 \mathcal{J}_\pm\, |u\rangle = \mathcal{J}_\pm\, \vec{\mathcal{J}}^2\, |u\rangle = a\hbar^2 \mathcal{J}_\pm\, |u\rangle. \tag{14}$$

Andererseits bemerken wir, daß für jeden beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ in

$$\langle\varphi\,|\,\vec{\mathcal{J}}^2\,\varphi\rangle = \langle\varphi\,|\,\mathcal{J}_x^2\,\varphi\rangle + \langle\varphi\,|\,\mathcal{J}_y^2\,\varphi\rangle + \langle\varphi\,|\,\mathcal{J}_z^2\,\varphi\rangle$$

die einzelnen Summanden stets positiv sind, weil wegen der Hermiteizität $\langle\varphi\,|\,\mathcal{J}_i^2\,\varphi\rangle = \langle\mathcal{J}_i\,\varphi\,|\,\mathcal{J}_i\,\varphi\rangle$ gilt und die Länge eines Vektors stets positiv ist. Lassen wir also die beiden ersten Summanden weg, so erhalten wir die Ungleichung

$$\langle\varphi\,|\,\vec{\mathcal{J}}^2\,\varphi\rangle \geqq \langle\varphi\,|\,\mathcal{J}_z^2\,\varphi\rangle \geqq 0.$$

Identifizieren wir $|\varphi\rangle$ mit einem Eigenvektor $|u\rangle$, so liefern die Gleichungen (12)

$$a \geqq M^2 \geqq 0$$

oder

$$-\sqrt{a} \leqq M \leqq \sqrt{a}, \tag{15}$$

d. h., die Eigenwerte M sind nach oben und unten beschränkt: Es gibt einen minimalen und einen maximalen Wert $M_{\min}$ bzw. $M_{\max}$.

Wendet man die Gleichung (13_+) speziell auf einen Eigenvektor an, der zu $M_{\max}$ gehört,

$$\mathcal{J}_z \mathcal{J}_+\, |u_{\max}\rangle = (M_{\max} + 1)\, \hbar\, \mathcal{J}_+ |u_{\max}\rangle,$$

so ist diese Gleichung nur zu erfüllen (weil $M_{\max}$ nicht überschritten werden kann), wenn

$$\mathcal{J}_+\, |u_{\max}\rangle = 0 \tag{16}$$

ist. Die Gleichung (7_-) liefert dann

$$\mathcal{J}_- \mathcal{J}_+ |u_{max}\rangle = (\vec{\mathcal{J}}^2 - \mathcal{J}_z^2 - \hbar \mathcal{J}_z)|u_{max}\rangle = 0,$$

d. h. nach Gl. (12)

$$a \hbar^2 - M_{max}^2 \hbar^2 - M_{max} \hbar^2 = 0.$$

Zwischen a und M_{max} besteht also der Zusammenhang

$$a = M_{max}(M_{max} + 1). \tag{17}$$

In entsprechender Weise liefert die Gleichung (13_-) in Anwendung auf $|u_{min}\rangle$

$$\mathcal{J}_z \mathcal{J}_- |u_{min}\rangle = (M_{min} - 1) \hbar \mathcal{J}_- |u_{min}\rangle.$$

Weil M_{min} nicht unterschritten werden darf, muß $\mathcal{J}_- |u_{min}\rangle = 0$ sein. Die Gleichung (7_+) liefert damit

$$\mathcal{J}_+ \mathcal{J}_- |u_{min}\rangle = (\vec{\mathcal{J}}^2 - \mathcal{J}_z^2 + \hbar \mathcal{J}_z) |u_{min}\rangle = 0.$$

Nach Gl. (12) ergibt sich hieraus der Zusammenhang

$$a = M_{min}(M_{min} - 1). \tag{18}$$

Wendet man schließlich die Gleichung (11_-) auf $|u_{max}\rangle$ an,

$$\mathcal{J}_z \mathcal{J}_-^n |u_{max}\rangle = (M_{max} - n) \hbar \mathcal{J}_-^n |u_{max}\rangle,$$

so kann man stets ein n finden (das Größtmögliche), so daß

$$M_{max} - n = M_{min} \tag{19}$$

ist [vgl. dazu Fußnote[1]), S. 295]. Aus den Gleichungen (17), (18) und (19) folgt

$$M_{max}(M_{max} + 1) = M_{min}(M_{min} - 1) = (M_{max} - n)(M_{max} - n - 1)$$

oder

$$M_{max} = \frac{n}{2} \quad (n \text{ positiv ganz}). \tag{20}$$

Wir bezeichnen künftig diesen größten Wert M_{max} mit J. Er kann also *nur ganz- oder halbzahlig* sein,

$$\boxed{J = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots}. \tag{21}$$

Die Größe a nimmt damit den Wert $J(J + 1)$ an, und nach Gl. (19) wird $M_{min} = -J$. Für M ergeben sich die $2J + 1$ Werte

$$\boxed{M = J, J - 1, \dots, -J}. \tag{22}$$

Nennen wir die zugehörigen Eigenvektoren $|u_J^M\rangle$, so lauten die Eigenwertgleichungen

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mathscr{J}}^2 |u_J^M\rangle &= J(J+1)\,\hbar^2\,|u_J^M\rangle \\ \mathscr{J}_z\,|u_J^M\rangle &= M\hbar\,|u_J^M\rangle \end{aligned}}\,.^{1)} \tag{23}$$

Die Eigenvektoren $|u_J^M\rangle$ sind orthogonal; wenn wir sie normieren, gilt

$$\langle u_J^M \mid u_{J'}^{M'}\rangle = \delta_{JJ'}\,\delta^{MM'}. \tag{24}$$

Die möglichen Meßwerte des Betrags des Drehimpulses $|\vec{\mathscr{J}}|$ ergeben sich also zu $\sqrt{J(J+1)}\,\hbar$. Mißt man nur diesen Betrag (und nicht gleichzeitig auch die z-Komponente), so liegt der Zustandsvektor nach der Feststellung eines Meßwertes $\sqrt{J(J+1)}\,\hbar$ irgendwie in dem $(2J+1)$-dimensionalen Eigenraum $\mathfrak{u}_J$ von $\vec{\mathscr{J}}^2$

$$|\Phi\rangle = \sum_{M=J}^{-J} \Phi^M\,|u_J^M\rangle \qquad \left(\sum_M |\Phi^M|^2 = 1\right). \tag{25}$$

Die Eigenwerte von $\vec{\mathscr{J}}^2$ sind also $(2J+1)$-fach („*Richtungsentartung*“). — Mißt man neben dem Betrag des Drehimpulses gleichzeitig auch noch die Komponente in einer Richtung (die wir z-Achse nennen), so können sich für diese nur die Werte $M\hbar$ ergeben („*Richtungsquantelung*“). Nach dieser Messung hat der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ die Richtung des zugehörigen $|u_J^M\rangle$. Eine solche Messung ist z. B. die Energiemessung an einem Elektron eines Atoms, das sich in einem äußeren Magnetfeld befindet, weil die Energie dann von der Komponente des Drehimpulses in Feldrichtung abhängt (§ 5). Man nennt daher M magnetische Quantenzahl.

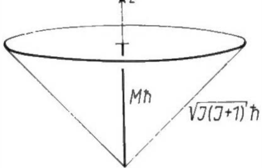


Fig. 76. Der Drehimpulskegel

Weil nicht alle Komponenten des Drehimpulses gleichzeitig gemessen werden können, ist es nicht möglich, die Meßwerte des quantenmechanischen Drehimpulses als gerichtete Strecke geometrisch aufzutragen. Man kommt der gewonnenen quantentheoretischen Aussage näher, wenn man den Drehimpuls durch einen Halbkegel darstellt, mit der Kegelachse in Richtung der gemessenen Komponente (z-Achse), der Höhe $M\hbar$ und

---

1) Weil in den Vertauschungsrelationen (1) der Operator $\mathscr{J}_z$ nicht vor $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ ausgezeichnet ist, haben die Operatoren $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ ebenfalls die Eigenwerte $M\hbar$. Die Eigenvektoren $|u_{J,x}^M\rangle$, $|u_{J,y}^M\rangle$, $|u_{J,z}^M\rangle$ von $\mathscr{J}_x$, $\mathscr{J}_y$ und $\mathscr{J}_z$ sind wegen der Nichtvertauschbarkeit der Operatoren natürlich verschieden (vgl. Aufg. 101).

der Mantellinie $\sqrt{J(J+1)}\,\hbar$ (Fig. 76). Die Angabe dieser beiden Größen bedeutet jedoch keine Angaben über die x- und y-Komponenten![1]

Da die Mantellinie stets größer ist als die Höhe des Kegels, besitzt der Kegel immer eine endliche Öffnung. In der älteren BOHR-SOMMERFELDschen Theorie hingegen war die Länge von $\vec{\mathscr{J}}$ durch J gegeben, so daß für die Fälle $M = \pm J$ der Drehimpulsvektor genau in die Richtung der z-Achse wies (Kegelöffnung Null). Da in diesen Fällen die x- und y-Komponente gleichzeitig mit der z-Komponente bekannt wäre, widerspricht dieses Ergebnis der Nichtvertauschbarkeit der Drehimpulskomponenten.

In Fig. 77 sind die beiden Einstellmöglichkeiten für $J = 1/2$ eingezeichnet. Im Fall $M = +1/2$ (Kegel nach oben geöffnet) sagt man — in Erinnerung an die BOHR-SOMMERFELDsche Theorie — der Drehimpuls ist „parallel" zur z-Achse, im anderen Fall, der Drehimpuls ist „antiparallel" zur z-Achse.

Für $J = 1$ gibt es drei Einstellmöglichkeiten, wobei für $M = 0$ der Kegel zu einer Scheibe in der xy-Ebene entartet.

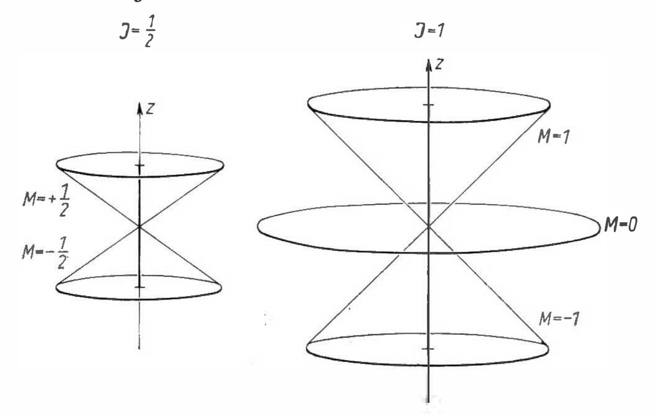


Fig. 77. Drehimpulskegel für $J = 1/2$ und 1

c) Die Wirkung von $\mathscr{J}_\pm$ bzw. $\mathscr{J}_x$ und $\mathscr{J}_y$ auf $|u_J^M\rangle$

Nach Gl. (13$_\pm$) und (14) ist $\mathscr{J}_\pm\,|u_J^M\rangle$ sowohl Eigenvektor von $\mathscr{J}_z$ zum Eigenwert $(M \pm 1)\,\hbar$ als auch Eigenvektor von $\vec{\mathscr{J}}^2$ zum Eigenwert $J(J+1)\,\hbar^2$. Die Vektoren $|\mathscr{J}_\pm u_J^M\rangle$ und $|u_J^{M\pm1}\rangle$ sind also parallel,

$$\mathscr{J}_\pm|u_J^M\rangle = c_\pm\,|u_J^{M\pm1}\rangle\,. \tag{26}$$

Die Koeffizienten $c_\pm$ bestimmen sich aus der Normierung der Vektoren unter Verwendung von Gl. (7$_\pm$)

$$|c_\pm|^2 = \langle\mathscr{J}_\pm u_J^M\,|\,\mathscr{J}_\pm u_J^M\rangle = \langle u_J^M\,|\,\mathscr{J}_\mp\mathscr{J}_\pm u_J^M\rangle$$
$$= \langle u_J^M\,|\,(\vec{\mathscr{J}}^2 - \mathscr{J}_z^2 \mp \hbar\,\mathscr{J}_z)\,u_J^M\rangle = \{J(J+1) - M^2 \mp M\}\,\hbar^2\,.$$

[1]) Der Kegelradius ist der Eigenwert $\sqrt{J(J+1) - M^2}\,\hbar$ des Operators $\sqrt{\vec{\mathscr{J}}^2 - \mathscr{J}_z^2} = \sqrt{\mathscr{J}_x^2 + \mathscr{J}_y^2}$. Aus dessen gleichzeitiger Meßbarkeit mit $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ darf man aber nicht schließen, daß damit auch $\mathscr{J}_x$ oder $\mathscr{J}_y$ gleichzeitig meßbar wäre.

Es gilt also bis auf eine willkürliche Phase

$$\boxed{\begin{aligned}\mathcal{J}_\pm|u_J^M\rangle &= \sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}\,\hbar\,|u_J^{M\pm 1}\rangle \\ &= \sqrt{(J\mp M)\,(J\pm M+1)}\,\hbar\,|u_J^{M\pm 1}\rangle\end{aligned}}\,.^{1)} \tag{27}$$

Nach Gl. (5) folgt damit für die Wirkung der Operatoren $\mathcal{J}_x$ und $\mathcal{J}_y$

$$\left.\begin{aligned}\mathcal{J}_x|u_J^M\rangle &= \frac{\hbar}{2}\,\Big\{\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,|u_J^{M+1}\rangle \\ &\qquad + \sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,|u_J^{M-1}\rangle\Big\}, \\ \mathcal{J}_y|u_J^M\rangle &= \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\Big\{\sqrt{J(J+1)-M(M+1)}\,|u_J^{M+1}\rangle \\ &\qquad - \sqrt{J(J+1)-M(M-1)}\,|u_J^{M-1}\rangle\Big\}.\end{aligned}\right\} \tag{28}$$

Für die *Matrixelemente* von $\mathcal{J}_\pm$ in der $\vec{\mathcal{J}}^2$, $\mathcal{J}_z$-Darstellung erhält man nach Gl. (27) nur in der ersten Nebendiagonale von Null verschiedene Elemente

$$\left.\begin{aligned}\langle u_J^{M\pm 1}\,|\,\mathcal{J}_\pm\,u_J^M\rangle &= \sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}\,\hbar, \\ \langle u_J^{M'}\,|\,\mathcal{J}_\pm\,u_J^M\rangle &= 0 \qquad \text{für} \qquad M' \neq M\pm 1.\end{aligned}\right\} \tag{29}$$

Für $J = 1$ ergeben sich z. B. die Matrizen

$$\left.\begin{aligned}\langle u_1^{M'}\,|\,\mathcal{J}_x\,u_1^M\rangle &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}, \\ \langle u_1^{M'}\,|\,\mathcal{J}_y\,u_1^M\rangle &= \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 0 & -\sqrt{2} & 0\end{pmatrix}, \\ \langle u_1^{M'}\,|\,\mathcal{J}_z\,u_1^M\rangle &= \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}, \\ \langle u_1^{M'}\,|\,\vec{\mathcal{J}}^2\,u_1^M\rangle &= \hbar^2\begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix}.\end{aligned}\right| \tag{30}$$

---

[1]) Hieraus ist ersichtlich, daß $\mathcal{J}_\pm\,|u_J^M\rangle$ innerhalb (15) nur für $M = \pm J$ verschwindet.

Weil der Operator $\mathcal{J}_-$ in $|u_J^M\rangle$ die magnetische Quantenzahl M um eins verringert, kann man durch mehrmalige Anwendung von $\mathcal{J}_-$ auf $|u_J^J\rangle$ alle $|u_J^M\rangle$ erzeugen. Aus Gl. (27) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_- |u_J^J\rangle &= \sqrt{(2J)\,1}\;\hbar\,|u_J^{J-1}\rangle,\\
\mathcal{J}_-^2 |u_J^J\rangle &= \sqrt{(2J)\,1}\sqrt{(2J-1)\,2}\;\hbar^2\,|u_J^{J-2}\rangle,\\
&\vdots\\
\mathcal{J}_-^n |u_J^J\rangle &= \sqrt{(2J)(2J-1)\cdots(2J-n+1)\,n!}\;\hbar^n\,|u_J^{J-n}\rangle\\
&= \sqrt{\frac{(2J)!\,n!}{(2J-n)!}}\;\hbar^n\,|u_J^{J-n}\rangle .
\end{aligned}$$

Ersetzen wir n durch $J-M$, so erhalten wir damit für die (normierten) Eigenvektoren

$$|u_J^M\rangle = \sqrt{\frac{(J+M)!}{(2J)!\,(J-M)!}}\left(\frac{\mathcal{J}_-}{\hbar}\right)^{J-M}|u_J^J\rangle . \tag{31}$$

Wendet man in analoger Weise $\mathcal{J}_+^n$ auf $|u_J^{-J}\rangle$ an, so ergibt sich

$$|u_J^M\rangle = \sqrt{\frac{(J-M)!}{(2J)!\,(J+M)!}}\left(\frac{\mathcal{J}_+}{\hbar}\right)^{J+M}|u_J^{-J}\rangle . \tag{32}$$

Außerdem sei nochmals vermerkt

$$\mathcal{J}_\pm|u_J^{\pm J}\rangle = 0. \tag{33}$$

Wendet man $\mathcal{J}_+$ auf einen Vektor $|\Phi\rangle = \sum\limits_M \Phi^M\,|u_J^M\rangle$ aus dem Eigenraum $\mathfrak{u}_J$ an, so resultiert ein Vektor ohne $|u_J^{-J}\rangle$-Komponente. Der Vektor $\mathcal{J}_+^2\,|\Phi\rangle$ besitzt keine Komponenten in Richtung $|u_J^{-J}\rangle$ und $|u_J^{-J+1}\rangle$. Fährt man so fort, so ergibt sich $\mathcal{J}_+^{2J+1}\,|\Phi\rangle = 0$. Entsprechend gilt $\mathcal{J}_-^{2J+1}\,|\Phi\rangle = 0$. Das heißt, die Operatoren $\mathcal{J}_\pm^{2J+1}$ wirken im Eigenraum $\mathfrak{u}_J$ wie der Nulloperator,

$$\boxed{\mathcal{J}_\pm^{2J+1} = \mathcal{O} \text{ in } \mathfrak{u}_J} . \tag{34}$$

Wegen des Zusammenhangs (4) ergeben sich hieraus Relationen zwischen Potenzen von $\mathcal{J}_x$ und $\mathcal{J}_y$, die für $J = \frac{1}{2}$ im § 4 angegeben sind.

d) Die Wirkung der Drehoperatoren auf die Drehimpulseigenvektoren

Weil der Betrag des Drehimpulses $\vec{\mathcal{J}}^2$ mit allen Komponenten $\mathcal{J}_i$ vertauscht, gilt dies auch für den Operator der Drehung [Gl. (3.6-32)]

$$\mathcal{R}_\mathfrak{e}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathfrak{e}\vec{\mathcal{J}})}$$

um eine beliebige Richtung $\mathfrak{e}$ (Drehwinkel α),

$$[\vec{\mathcal{J}}^2, \mathcal{R}_\mathfrak{e}(\alpha)] = \mathcal{O} . \tag{35}$$

Hieraus folgt, daß $|\mathscr{R}_e(\alpha)\, u_J^M\rangle$ Eigenvektor von $\vec{\mathscr{J}}^2$ zum Eigenwert $J(J+1)\,\hbar^2$ ist. Er liegt im Eigenraum $\mathfrak{u}_J$ und kann also als Linearkombination

$$\boxed{|\mathscr{R}_e(\alpha)\, u_J^M\rangle = \sum_{M'} |u_J^{M'}\rangle\, R_J^{M'M}(e, \alpha)} \tag{36}$$

geschrieben werden. Die Koeffizienten

$$R_J^{M'M}(e, \alpha) = \langle u_J^{M'} \,|\, \mathscr{R}_e(\alpha)\, u_J^M\rangle \tag{37}$$

sind die $(2J+1)$-dimensionalen Matrixelemente von $\mathscr{R}_e(\alpha)$. Diese „Drehmatrizen" bestimmen nach Gl. (36) das Transformationsverhalten der Drehimpulseigenfunktionen bei Raumdrehungen. [Darstellungsmatrizen der Drehgruppe (vgl. 5.4 § 7)]. Von WIGNER wurde explizit eine Formel für diese Matrizen (ausgedrückt in EULERschen Winkeln) angegeben. Wir wollen hier jedoch nicht weiter darauf eingehen und verweisen den Leser auf ein ausführliches Lehrbuch der Quantentheorie des Drehimpulses (z. B. M. E. ROSE: Elementary Theory of Angular Momentum, New York, 1963).

e) Der Aufbau des unitären Raumes aus Drehimpulseigenvektoren

Für ein physikalisches System wird es i. allg. Observable $\mathscr{G}$ geben, die mit $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ vertauschbar, aber keine Funktionen von $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ allein sind (z. B. ein drehinvarianter HAMILTON-Operator, vgl. § 3).

$$[\vec{\mathscr{J}}^2, \mathscr{G}] = \mathscr{O}, \qquad [\mathscr{J}_z, \mathscr{G}] = \mathscr{O}. \tag{38}$$

Die Drehimpulseigenvektoren $|u_J^M\rangle$ sind dann nach 3.4 § 2 nicht vollständig.

Die Operatoren $\vec{\mathscr{J}}^2$, $\mathscr{J}_z$, $\mathscr{G}$ besitzen gemeinsame Eigenvektoren $|u_{\gamma J}^M\rangle$,

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{\mathscr{J}}^2\, |u_{\gamma J}^M\rangle &= J(J+1)\,\hbar^2\, |u_{\gamma J}^M\rangle \\ \mathscr{J}_z\, |u_{\gamma J}^M\rangle &= M\hbar\, |u_{\gamma J}^M\rangle \\ \mathscr{G}\, |u_{\gamma J}^M\rangle &= \gamma\, |u_{\gamma J}^M\rangle \end{aligned}}\,. \tag{39}$$

Wenn der Operatorensatz $\vec{\mathscr{J}}^2$, $\mathscr{J}_z$ und $\mathscr{G}$ vollständig ist[1]), so spannen die Eigenvektoren $|u_{\gamma J}^M\rangle$ den gesamten unitären Raum $\mathfrak{U}$ auf. Für die Drehimpulsoperatoren bedeutet γ einen Entartungsindex, im unitären Raum $\mathfrak{U}$ kommen die Drehimpuls-Eigenräume $\mathfrak{u}_J$ also öfters vor. Zum Beispiel werden die Energie-Eigenwerte eines drehinvarianten HAMILTON-Operators nicht durch J allein gekennzeichnet, es gibt zu einem J mehrere Energie-Eigenwerte.

---

[1]) Für *ein* Teilchen ohne Spin ist z. B. $\vec{\ell}^2$, ℓ_z, $\vec{p}^2$ oder $\vec{\ell}^2$, ℓ_z, $\vec{x}^2$ vollständig.

Die Basisvektoren $|u^M_{\gamma J}\rangle$ sind orthonormiert,

$$\langle u^M_{\gamma J} \mid u^{M'}_{\gamma' J'}\rangle = \delta(\gamma, \gamma')\, \delta_{JJ'}\, \delta^{MM'}, \tag{40}$$

ihre Phasen seien so gewählt, daß wiederum

$$\mathscr{J}_\pm\, |u^M_{\gamma J}\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}\, \hbar\, |u^{M\pm 1}_{\gamma J}\rangle \tag{41}$$

gilt, was möglich ist, wenn $\mathscr{G}$ auch mit $\mathscr{J}_\pm$ vertauscht.

Aufg. 100: Wie groß ist der Erwartungswert $\langle \mathscr{J}_x\rangle$ und die Unschärfe ΔJ_x für ein System, das sich in einem Eigenzustand $|u^M_J\rangle$ von $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ befindet?

Aufg. 101: Man berechne die Wahrscheinlichkeiten für die in 3.3 § 5 und § 7 diskutierten Drehimpulsmessungen durch Stern-Gerlach-Anordnungen.

§ 2. Der Bahndrehimpuls

a) Die Ganzzahligkeit der Bahndrehimpulseigenwerte

Die im vorangehenden Kapitel durchgeführten Untersuchungen des Eigenwertproblems des Drehimpulses fußten allein auf den Vertauschungsrelationen der Drehimpulskomponenten untereinander. Wir wollen jetzt die spezielle Realisierung des Drehimpulses betrachten, die durch die Bahnbewegung eines Teilchens zustande kommt. Vom Bahndrehimpulsoperator

$$\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p} \tag{42}$$

kann man wieder nur eine Komponente — die wir zur z-Komponente machen — und den Betrag $\vec{\ell}^2$ gleichzeitig diagonalisieren,

$$\begin{aligned} \vec{\ell}^2\, |u^m_{\gamma l}\rangle &= l(l+1)\,\hbar^2\, |u^m_{\gamma l}\rangle, \\ \ell_z\, |u^m_{\gamma l}\rangle &= m\hbar\, |u^m_{\gamma l}\rangle. \end{aligned} \tag{43}$$

An Stelle von J und M schreiben wir jetzt die Bahndrehimpulsquantenzahl l und die azimutale oder magnetische Quantenzahl m, zwischen denen nach Gl. (22) der Zusammenhang

$$m = l, l-1, \ldots, -l \tag{44}$$

besteht. Wegen der speziellen Struktur (42) sind jetzt jedoch nur *ganz*zahlige Werte von l und m möglich. Um dies einzusehen, entwickeln wir den *Orts*eigenvektor $|u_{x=0,y=0,z}\rangle$, der zu einem Punkt auf der z-Achse gehört, nach Bahndrehimpulszuständen,

$$|u_{00z}\rangle = \sum_{\gamma l m} c^m_{\gamma l}\, |u^m_{\gamma l}\rangle. \tag{45}$$

Wenden wir hierauf den Operator

$$\ell_z = p_y\, x - p_x\, y$$

an, so erhalten wir

$$\ell_z \,|u_{00z}\rangle = 0 = \sum_{\gamma l m} c_{\gamma l}^m \, m\hbar \,|u_{\gamma l}^m\rangle .$$

Hieraus folgt

$$c_{\gamma l}^m m = 0,$$

d. h., für $m \neq 0$ muß $c_{\gamma l}^m = 0$ sein. Da bei halbzahligem l sicher $m \neq 0$ ist, treten also in Gl. (45) keine Glieder mit halbzahligem l auf,

$$|u_{00z}\rangle = \sum_{\gamma l} c_{\gamma l}^0 \,|u_{\gamma l}^0\rangle \qquad (l = \text{ganz}). \tag{46}$$

Durch Anwendung eines geeigneten Drehoperators $\mathcal{R}$ (vgl. Aufg. 92) auf $|u_{00z}\rangle$ können wir einen beliebigen Ortseigenvektor $|u_\mathfrak{r}\rangle$ gewinnen. Auf der rechten Seite von Gl. (46) verändern sich dabei die Drehimpulsquantenzahlen l nicht [Gl. (36)]. Bei einem physikalischen System, dessen Observable nur Funktionen von $\vec{x}$ und $\vec{p}$ sind, bilden die Vektoren $|u_\mathfrak{r}\rangle$ eine vollständige Basis von $\mathfrak{U}$ (4.1 § 1). Damit läßt sich jeder Vektor dieses unitären Raumes nach Drehimpulseigenvektoren $|u_{\gamma l}^m\rangle$ mit nur ganzzahligem l entwickeln. Halbzahlige Drehimpulsquantenzahlen treten nicht auf.

Die durch l klassifizierten Eigenzustände von $\vec{\ell}^{\,2}$ bezeichnet man häufig mit den Buchstaben

$$\begin{array}{cccccc} s & p & d & f & g & \cdots, \end{array}$$

entsprechend (47)

$$\begin{array}{cccccc} l = 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & \cdots \end{array}$$

Diese Nomenklatur ist der Spektroskopie entlehnt.

b) Der Bahndrehimpuls in der Ortsdarstellung

Wenn wir uns daran erinnern, daß in der Ortsdarstellung der Ortsoperator multiplikativ wirkt und die Impulskomponenten durch $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}$ dargestellt werden, so finden wir für die Komponenten des Bahndrehimpulsoperators $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$ in der Ortsdarstellung $\langle u_\mathfrak{r} \,|\, \ell_i f\rangle = \ell_i f(\mathfrak{r})$,

$$\begin{aligned} \ell_x f(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) f(x, y, z), \\ \ell_y f(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) f(x, y, z), \\ \ell_z f(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) f(x, y, z) \end{aligned} \tag{48}$$

bzw. für

$$\begin{aligned} \ell_+ f(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\left\{(y - ix)\frac{\partial}{\partial z} - z\left(\frac{\partial}{\partial y} - i\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\} f(x, y, z), \\ \ell_- f(x, y, z) &= \frac{\hbar}{i}\left\{(y + ix)\frac{\partial}{\partial z} - z\left(\frac{\partial}{\partial y} + i\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\} f(x, y, z). \end{aligned} \tag{49}$$

Es ist zweckmäßig, die Wirkung dieser Operatoren auf Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ)

$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi, \quad y = r \sin\vartheta \sin\varphi, \quad z = r \cos\vartheta$$

umzurechnen. Beachtet man, daß nach der Kettenregel zwischen den Differentialquotienten der Zusammenhang

$$\frac{\partial f}{\partial\vartheta} = \frac{\partial f}{\partial x} r \cos\vartheta \cos\varphi + \frac{\partial f}{\partial y} r \cos\vartheta \sin\varphi - \frac{\partial f}{\partial z} r \sin\vartheta,$$

$$\frac{\partial f}{\partial\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial x} r \sin\vartheta \sin\varphi + \frac{\partial f}{\partial y} r \sin\vartheta \cos\varphi$$

besteht, so verifiziert man leicht, daß gilt

$$\begin{aligned} \ell_z f(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial f}{\partial\varphi}, \\ \ell_\pm f(r, \vartheta, \varphi) &= \hbar \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\vartheta} + \mathrm{i} \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) f. \end{aligned} \tag{50}$$

Aus Gl. (9) folgt dann für

$$\vec{\ell}^{\,2} f(r, \vartheta, \varphi) = -\hbar^2 \left\{\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} f. \tag{51}$$

Die *Eigenfunktionen* von ℓ_z in der Ortsdarstellung (r, ϑ, φ) sind bezüglich r und ϑ unbestimmt, weil ℓ_z auf r und ϑ nicht wirkt. Die Abhängigkeit vom Winkel φ liefert die Eigenwertgleichung

$$\ell_z \Phi^m(\varphi) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}\Phi^m}{\mathrm{d}\varphi} = m\hbar\Phi^m. \tag{52}$$

Sie hat die Lösung

$$\Phi^m(\varphi) = c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{53}$$

Die im Abschnitt a) bewiesene Ganzzahligkeit von m bedeutet, daß die Lösung $\Phi^m(\varphi)$ eine *eindeutige* Funktion von φ ist, es gilt

$$\Phi^m(\varphi) = \Phi^m(\varphi + 2\pi).$$

Die Konstante c in Gl. (53) bestimmt sich aus der Normierungsbedingung

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi)\,\Phi(\varphi)\,\mathrm{d}\varphi = |c|^2\, 2\pi = 1.$$

Damit lauten die Eigenfunktionen der z-Komponente des Bahndrehimpulses

$$\boxed{\Phi^m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}. \tag{54}$$

Die Eigenfunktionen von $\vec{\ell}^{\,2}$ sind bezüglich r unbestimmt. Ihre ϑ, φ-Abhängigkeit wird nach Gl. (51) durch die Differentialgleichung

$$-\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial u_l(\vartheta, \varphi)}{\partial\vartheta}\right) - \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 u_l(\vartheta, \varphi)}{\partial\varphi^2} = l(l+1)\, u_l(\vartheta, \varphi) \tag{55}$$

festgelegt. Dabei haben wir von dem im § 1 gewonnenen Ergebnis Gebrauch gemacht, wonach $\vec{\ell}^2$ die Eigenwerte $l(l+1)\,\hbar^2$ besitzt. Die gemeinsamen Eigenfunktionen von $\vec{\ell}^2$ und ℓ_z müssen von φ entsprechend Gl. (54) abhängen. Sie sind also von der Form

$$u_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \theta_l^m(\vartheta)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{56}$$

Für die Funktionen $\theta_l^m(\vartheta)$ erhält man aus Gl. (55)

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\mathrm{d}\theta_l^m}{\mathrm{d}\vartheta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right]\theta_l^m(\vartheta) = 0. \tag{57}$$

Dies ist die Differentialgleichung der „*Kugelfunktionen*". Man kann zeigen, daß diese Gleichung in der Tat nur für $l = 0, 1, 2, \ldots$ reguläre Lösungen $\theta_l^m(\vartheta)$ besitzt.

Mit Hilfe der Operatoren ℓ_+ und ℓ_- kann man die Funktionen $\theta_l^m(\vartheta)$ direkt berechnen. Zunächst ist nach Gl. (33) $(J \to l)$

$$\ell_+\,|u_l^l\rangle = 0.$$

In der Darstellung (50) führt dies auf die Differentialgleichung

$$\ell_+ u_l^l(\vartheta, \varphi) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\mathrm{d}\theta_l^l}{\mathrm{d}\vartheta} - l\cot\vartheta\cdot\theta_l^l\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi} = 0$$

oder

$$\frac{\mathrm{d}\theta_l^l}{\mathrm{d}\vartheta} = l\cot\vartheta\cdot\theta_l^l$$

mit der Lösung

$$\theta_l^l(\vartheta) = c_l\sin^l\vartheta. \tag{58}$$

Die Ausführung des Normierungsintegrals

$$\int_0^\pi |\theta_l^l(\vartheta)|^2 \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta = |c_l|^2\int_0^\pi \sin^{2l+1}\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta = |c_l|^2\,\frac{2^{2l+1}\,l!^2}{(2l+1)!} = 1$$

ergibt

$$c_l = (-1)^l\,\frac{1}{2^l\,l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}, \tag{59}$$

wobei für die Phase — entsprechend einer häufig üblichen Festsetzung — willkürlich $(-1)^l$ gewählt wurde.

Die Funktionen $\theta_l^m(\vartheta)$ mit $m < l$ gewinnt man nach Gl. (31) aus $\theta_l^l(\vartheta)$ mittels des Operators ℓ_-^{l-m}

$$\theta_l^m(\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\left(\frac{\ell_-}{\hbar}\right)^{l-m}\theta_l^l(\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}.$$

Die Ortsdarstellung (50) von ℓ_- ergibt (für eine beliebige Funktion $\theta(\vartheta)$)

$$\begin{aligned}\ell_-\left(\theta(\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}\right) &= -\,\hbar\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-1)\varphi}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} + l\cot\vartheta\right)\theta(\vartheta)\\ &= -\,\hbar\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-1)\varphi}\frac{1}{\sin^l\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin^l\vartheta\,\theta(\vartheta)\right)\\ &= +\,\hbar\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-1)\varphi}\frac{1}{\sin^{l-1}\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)}\left(\sin^l\vartheta\,\theta(\vartheta)\right)\end{aligned}$$

und bei n-maliger Anwendung

$$\ell_-^n\left(\theta(\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\varphi}\right) = \hbar^n\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-n)\varphi}\frac{1}{\sin^{l-n}\vartheta}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)^n}\left(\sin^l\vartheta\,\theta(\vartheta)\right).$$

Setzt man $n = l - m$, so erhält man bei Einsetzen von $\theta_l^l(\vartheta)$

$$\boxed{\theta_l^m(\vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l\,l!}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}\,\frac{1}{\sin^m\vartheta}\frac{\mathrm{d}^{l-m}}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)^{l-m}}\sin^{2l}\vartheta}\,.\text{ [1]} \tag{60}$$

Wäre man andererseits von der Funktion $\theta_l^{-l}(\vartheta)$ ausgegangen, so hätte man nach Gl. (32) durch Anwendung von ℓ_+^{l+m} ebenfalls $\theta_l^m(\vartheta)$ gewonnen. Auf diesem Weg ergibt sich

$$\boxed{\theta_l^m(\vartheta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l\,l!}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,\sin^m\vartheta\,\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}(\cos\vartheta)^{l+m}}\sin^{2l}\vartheta}\,. \tag{61}$$

Von der Gleichheit der Darstellungen (60) und (61) kann man sich auch durch Ausdifferentiation überzeugen. Durch Vergleich von (60) und (61) sieht man unmittelbar die Gültigkeit der Beziehung

$$\theta_l^m(\vartheta) = (-1)^m\,\theta_l^{-m}(\vartheta) \tag{62}$$

Zusammenhang mit den Legendreschen Funktionen

Die Legendreschen Polynome sind durch

$$P_l(\zeta) = \frac{1}{2^l\,l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\zeta^l}(\zeta^2-1)^l \qquad (l = 0, 1, 2, \ldots) \tag{63}$$

definiert. Sie sind vom Grade l. Unter den zugeordneten Legendreschen Funktionen P_l^m versteht man

$$P_l^m(\zeta) = (1-\zeta^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}\zeta^m}P_l(\zeta)\text{ [2]} \qquad (m = \text{positiv}(!) = 0, 1, \ldots, l). \tag{64}$$

[1]) Die hier getroffene Phasenwahl stimmt überein mit den Büchern von Condon-Shortley, Messiah, Rose, Edmonds. Sie unterscheidet sich um $(-1)^l$ gegenüber Ludwig, Becker-Sauter, um $(-1)^m$ gegenüber Bethe (Handbuch d. Physik) und Flügge. Die Phasenwahl von Schiff, Döring, Blochinzew ist für $m > 0$ um $(-1)^m$ von unserer verschieden, während sie für $m < 0$ übereinstimmt. Ist der Unterschied l-abhängig, so rührt dies von einer anderen Wahl von c_l [Gl. (59)] her. Ist er hingegen m-abhängig, so bedeutet es eine andere Phasenwahl von $c_\pm$ [Gl. (26)].

[2]) In der mathematischen Literatur wird manchmal noch ein Faktor $(-1)^m$ hinzugefügt.

Mit $\zeta = \cos\vartheta$ erhält man daraus

$$P_l^m(\vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l\, l!} \sin^m \vartheta \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}\,(\cos\vartheta)^{l+m}} \sin^{2l}\vartheta. \tag{65}$$

Damit ergibt sich folgender Zusammenhang mit unseren $\theta_l^m(\vartheta)$

$$\left.\begin{aligned} \theta_l^m(\vartheta) &= (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\vartheta) \\ \theta_l^{-m}(\vartheta) &= +\sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\, P_l^m(\vartheta) \end{aligned}\right\} \quad (l \geqq m \geqq 0). \tag{66}$$

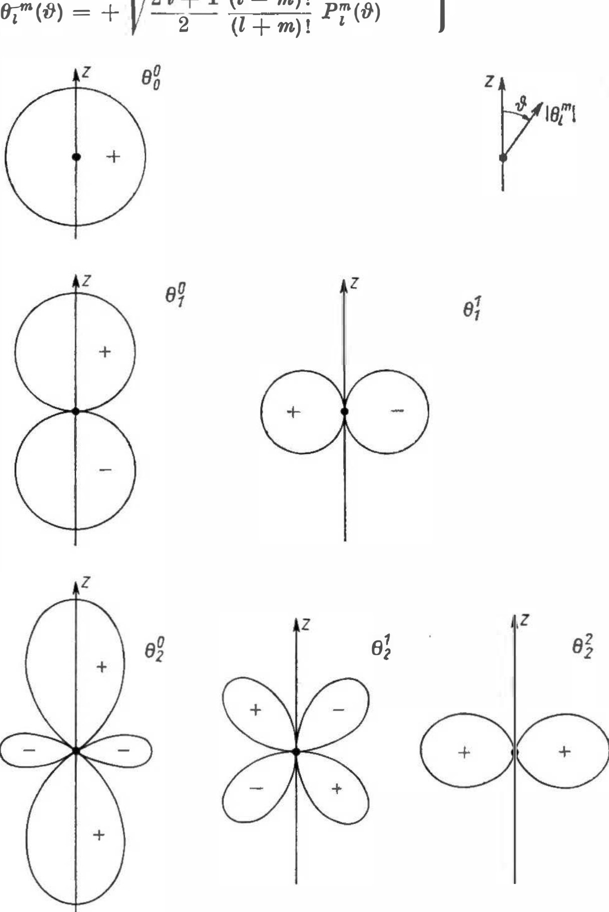


Fig. 78. Polardiagramme der Funktionen $\theta_l^m(\vartheta)$

Die Bahndrehimpulseigenfunktionen

$$u_l^m(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \theta_l^m(\vartheta)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{67}$$

bezeichnet man als „*Kugelflächenfunktionen*" $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Sie bilden ein vollständiges, normiertes Orthogonalsystem,

$$\left.\begin{aligned} &\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'}^{m'}(\vartheta,\varphi)\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \delta_{ll'}\,\delta^{mm'}, \\ &\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=l}^{-l} Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi)\, Y_l^m(\vartheta',\varphi') = \frac{\delta(\vartheta-\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\vartheta}, \end{aligned}\right\} \tag{68}$$

nach dem sich Funktionen $f(\vartheta, \varphi)$ auf der Einheitskugel entwickeln lassen,

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=l}^{-l} c_l^m\, Y_l^m(\vartheta,\varphi). \tag{69}$$

Die Kugelflächenfunktionen haben die Eigenschaft

$$Y_l^{m*}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\, Y_l^{-m}(\vartheta,\varphi). \tag{70}$$

Bei einer *Inversion* am Nullpunkt $\mathfrak{r} \to -\mathfrak{r}$, d. h., $(\vartheta, \varphi) \to (\pi - \vartheta, \varphi + \pi)$, gilt

$$Y_l^m(\pi-\vartheta,\varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_l^m(\vartheta,\varphi). \tag{71}$$

Der Faktor $(-1)^l$ ist die *Parität* (3.6 § 7b) des Bahndrehimpulseigenzustandes.

Die ersten Kugelflächenfunktionen lauten explizit

$$\left.\begin{aligned} &Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ &Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta, \qquad Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi}, \\ &Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1), \qquad Y_2^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\vartheta\cos\vartheta\, e^{\pm i\varphi}, \\ &\qquad\qquad Y_2^{\pm2} = +\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}\right\} \tag{72}$$

Aufg. 102: Welche Matrixelemente $\langle u_{\gamma' l'}^{m'} \mid \vec{x}\, u_{\gamma l}^{m}\rangle$, $\langle u_{\gamma' l'}^{m'} \mid \vec{m}\, u_{\gamma l}^{m}\rangle$ sind Null?

§ 3. Kugelsymmetrische Hamilton-Operatoren

Befindet sich ein Teilchen unter dem Einfluß einer *Zentralkraft*, so verschwindet das Drehmoment des Teilchens bezüglich des Zentrums, und der Drehimpuls ist konstant. Für den Drehimpulsoperator gilt daher

$$\mathring{\vec{\ell}} = \frac{i}{\hbar}[\mathscr{H}, \vec{\ell}] = \mathcal{O}, \tag{73}$$

d. h., die Komponenten des Drehimpulses sind mit $\mathscr{H}$ vertauschbar. Hieraus folgt, daß dann auch $\vec{\ell}^2$ mit $\mathscr{H}$ vertauscht,

$$[\mathscr{H}, \vec{\ell}^2] = \mathcal{O}. \tag{74}$$

Wenn die Zentralkraft ein Potential $\mathscr{V}$ besitzt, so kann dieses nur vom Abstand r des Zentrums abhängig sein; $\mathscr{V}(r)$ ist *kugelsymmetrisch*. Beispiele hier-

für sind:

$$
\begin{array}{lll}
\text{Freies Teilchen} & \mathcal{V}(\mathscr{r}) = \mathcal{V}_0 \mathbf{1} = \text{const} \cdot \mathbf{1}, & \\[6pt]
\text{Coulomb-Potential} & \mathcal{V}(\mathscr{r}) = \dfrac{q_1 q_2}{\mathscr{r}}, & \\[6pt]
\text{Yukawa-Potential} & \mathcal{V}(\mathscr{r}) = g^2 \dfrac{e^{-\mathscr{r}/r_0}}{\mathscr{r}}, & (75) \\[6pt]
\text{Potentialtopf} & \mathcal{V}(\mathscr{r}) = \begin{cases} -V_0 \mathbf{1} & \text{für } r < r_0 \\ \mathcal{O} & \text{für } r > r_0, \end{cases} & \\[6pt]
\text{Oszillatorpotential} & \mathcal{V}(\mathscr{r}) = \dfrac{m\omega^2}{2} \mathscr{r}^2. &
\end{array}
$$

Die drei letzteren sind besonders wichtige Modelle für die Kernkräfte.

Es möge das Eigenwertproblem

$$\mathscr{H} \, | u_E \rangle = E \, | u_E \rangle \tag{76}$$

des Hamilton-Operators

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m} \vec{\mathscr{p}}^{\,2} + \mathcal{V}(\mathscr{r}) \tag{77}$$

näher untersucht werden. Wegen der Vertauschbarkeit (73) und (74) können wir solche Eigenvektoren $|u_E\rangle$ wählen, die gleichzeitig auch Eigenvektoren von $\vec{\ell}^{\,2}$ und ℓ_z sind. In der Ortsdarstellung $\langle u_{\mathfrak{r}} \,|\, u_E \rangle = u_E(\mathfrak{r}) = u_E(r, \vartheta, \varphi)$ muß daher die Winkelabhängigkeit durch die Kugelflächenfunktionen gegeben sein,

$$u_E(\mathfrak{r}) = C\, R(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi). \tag{78}$$

Die Differentialgleichung für die Radialabhängigkeit $R(r)$ erhalten wir aus der Eigenwertgleichung (76), die in der Ortsdarstellung lautet

$$\mathscr{H} u_E(\mathfrak{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)\right) u_E(\mathfrak{r}) = E\, u_E(\mathfrak{r}). \tag{79}$$

Vergleicht man den Laplaceschen Operator Δ in Kugelkoordinaten mit der Darstellung (51) von $\vec{\ell}^{\,2}$, so ergibt sich

$$\mathscr{H} u_E(\mathfrak{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2 r u_E}{\partial r^2} + \frac{1}{2m} \frac{1}{r^2} \vec{\ell}^{\,2} u_E + V(r)\, u_E = E\, u_E. \tag{80}$$

Wegen $\vec{\ell}^{\,2} u_E = l(l+1)\, \hbar^2 u_E$ erhält man damit nach Abspaltung von Y_l^m für den radialen Anteil

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2 r R}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = E R. \tag{81}$$

Diese Eigenwertgleichung legt die möglichen Energien E fest. Setzt man für die radialen Energieeigenfunktionen

$$R_E(r) = \frac{1}{r} \chi_E(r), \tag{82}$$

so erhält man für $\chi_E(r)$ die einfachere Differentialgleichung

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_E(r) = E\chi_E(r)}. \tag{83}$$

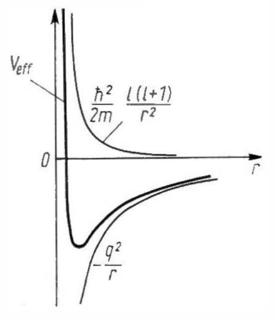


Fig. 79. Überlagerung von COULOMB-Potential und Zentrifugalpotential zu V_{eff}

Diese Gleichung können wir als zeitunabhängige, eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung interpretieren, in der neben dem Potential $V(r)$ noch ein Zusatzglied $\frac{\hbar^2}{m2}\frac{l(l+1)}{r^2}$ vorhanden ist, das man *Zentrifugalpotential* nennt (Fig. 79).

Für $l \neq 0$ und *kleine Abstände* r überwiegt in allen Beispielen (75) das Zentrifugalpotential über $V(r)$. Daher vereinfacht sich die Gl. (83) zu

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_E}{\mathrm{d}r^2} = \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_E \quad \text{für} \quad r \to 0. \tag{84}$$

Diese Differentialgleichung ist vom EULERschen Typ und läßt sich durch einen Potentialansatz $\chi_E = cr^\alpha$ lösen. Durch Einsetzen ergibt sich

$$\alpha(\alpha - 1) = l(l+1),$$

d. h.

$$\alpha = l + 1 \quad \text{oder} \quad \alpha = -l,$$

also

$$\chi_E(r \to 0) = c_1 r^{l+1} + c_2 r^{-l}.$$

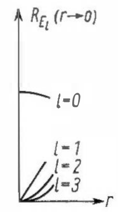


Fig. 80. Radiale Energieeigenfunktionen im Nullpunkt

Wegen der Normierbarkeit ist es jedoch nötig, $c_2 = 0$ zu setzen. Die radialen Eigenfunktionen verhalten sich also wie

$$R_{E_l}(r \to 0) = cr^l, \tag{85}$$

d. h. wie Parabeln der Ordnung l, die mit zunehmendem l immer flacher aus dem Nullpunkt herauskommen (Fig. 80). — Die Gl. (85) bleibt anch für s-Zustände ($l = 0$) gültig, weil $\chi_E(0)$ stets Null sein muß.[1])

[1]) Die HERMITEizität von (83) ist gewährleistet, wenn $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}$ HERMITEsch ist. Wegen $0 \leq r \leq \infty$ ist dazu notwendig (vgl. Aufg. 42), daß mit $\chi(\infty)$ auch $\chi(0)$ verschwindet.

Wenn das Potential $V(r)$ in *großer Entfernung* verschwindet[1]), wird aus Gl. (83)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\chi_E}{\mathrm{d}r^2} = E\chi_E \quad \text{für} \quad r \to \infty. \tag{86}$$

Für *negative Energien*, $E < 0$, ist die Lösung

$$\chi_E(r \to \infty) = C_1 \mathrm{e}^{-\varkappa r} + C_2 \mathrm{e}^{\varkappa r}, \quad \varkappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

nur normierbar,

$$\langle u_E \mid u_E \rangle = \int_0^\infty R^2(r)\, r^2 \mathrm{d}r = \int_0^\infty |\chi_E|^2\, \mathrm{d}r = 1, \tag{87}$$

wenn $C_2 = 0$ wird. Es gilt also

$$R_E(r \to \infty) = C_1 \frac{\mathrm{e}^{-\varkappa r}}{r}. \tag{88}$$

Diese Forderung ist zusammen mit der Bedingung (85) nur für bestimmte, diskrete Energiewerte, die *Eigenwerte* E_{nl} von $\mathscr{H}$, realisierbar. Die Eigenfunktionen

$$u_{E_{nl}}(\mathfrak{r}) = R_{nl}(r) \sum_m c_l^m Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{89}$$

sind $(2l + 1)$-fach, weil durch das Potential $V(r)$ keine Richtung im Raum ausgezeichnet wird.

Für *positive Energien*, $E > 0$, hat (86) die oszillierende Lösung

$$R_{E,l}(r \to \infty) = C\frac{\sin(kr + \varphi_l)}{r}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{90}$$

Da jetzt die Lösungen $R_{E,l}(r)$ von Gl. (81) nur die eine Bedingung (85) erfüllen müssen, gibt es keine Einschränkungen für die möglichen Energiewerte. Für jeden Wert $E > 0$ gibt es ungebundene Lösungen u_E, von der Gestalt (89), aber summiert über *m und l*. Die konstante Phase φ_l in Gl. (90) wird durch die Lösung $R_{E,l}(r)$ bestimmt. Ist das Potential $V = 0$, so ergibt sich $\varphi_l^0 = -\frac{l\pi}{2}$ [vgl. Gl. (1.5–23)]. Ein Potential $V \neq 0$ äußert sich also in großer Entfernung durch den Phasenunterschied

$$\delta_l = \varphi_l - \varphi_l^0 = \varphi_l + \frac{l\pi}{2}, \tag{91}$$

den man *Streuphase* nennt. Sie hängt eng mit dem Wirkungsquerschnitt zusammen (vgl. Kap. 4.7 und Aufg. 122).

§ 4. Der Spin $s = 1/2$

Außer dem Bahndrehimpuls $\vec{\ell} = \vec{x} \times \vec{p}$ besitzen die Elektronen und die meisten anderen Elementarteilchen noch einen inneren Drehimpuls. Im Wellenbild ist dieser Spin — wie bereits in 1.3 § 1 und 1.7 § 4 erwähnt — ein Ausdruck

[1]) Eine genauere Analyse zeigt, daß das Potential stärker als $1/r$ verschwinden muß.

für die Polarisation der Feldgrößen. Er wird durch das Transformationsverhaltens der Feldkomponenten gegenüber Raumdrehungen bestimmt.

Von GOUDSMIT und UHLENBECK wurde (1926) erstmals für Elektronen das Konzept des Spins formuliert. PAULI hat diese Idee durch die Einführung eines Spin-Operators $\vec{\sigma}$, dessen Komponenten (z. B. σ_z) nur die Eigenwerte $\pm \hbar/2$ annehmen sollen, mathematisch konzipiert. Durch die DIRAC-Gleichung konnte der Spin schließlich feldtheoretisch fundiert werden. Die Einführung des Elektronenspins und des damit verbundenen magnetischen Momentes (§ 5) machte die Feinstruktur und den anomalen ZEEMAN-Effekt der Atomspektren verständlich. Neben diesen sich magnetisch äußernden Eigenschaften besitzt der Spin auch ohne äußeres Magnetfeld über das PAULI-Prinzip für Mehrteilchenprobleme entscheidende Bedeutung (vgl. Aufg. 110 und 4.5 § 6f).

Der Spin ist nicht in dem unitären Raum $\mathfrak{U}_B$ der Bahnbewegung, etwa aufgespannt durch die Eigenvektoren $|u_{\mathfrak{r}}\rangle$ des Ortsoperators (4.1 § 6), beschreibbar. Es muß vielmehr ein Spinraum $\mathfrak{u}_s$, gebildet mit Spin-Eigenvektoren, hinzugenommen werden. Dieser Raum ist für Elektronen — ebenso wie für Protonen, Neutronen und viele andere Elementarteilchen — ein *zwei*dimensionaler Drehimpuls-Eigenraum. Die Spin-Observablen sind mit den Observablen der Bahnbewegung vertauschbar. Man kann daher den gesamten unitären Raum eines Elektrons $\mathfrak{U}_{\text{el}}$ als direkten Produktraum aus $\mathfrak{U}_B$ und $\mathfrak{u}_s$ konstruieren,

$$\mathfrak{U}_{\text{el}} = \mathfrak{U}_B \times \mathfrak{u}_s \,. \tag{92}$$

Ein beliebiger Ein-Elektronenzustand ist irgendein Vektor $|\Phi\rangle$ in diesem Produktraum. Zunächst wollen wir uns mit den Eigenschaften des zweidimensionalen Spinraums $\mathfrak{u}_{s=\frac{1}{2}}$ beschäftigen.

Der Spin ist ein Drehimpuls, die Komponenten des Spin-Operators $\vec{\sigma}$ erfüllen daher die in § 1 abgeleiteten Drehimpulsrelationen. Weil der Elektronenspin in irgendeiner Richtung nur zwei Einstellmöglichkeiten mit den Werten $\pm \hbar/2$ besitzen soll, finden jetzt also auch die aus den Vertauschungsrelationen bereits abgeleiteten halbzahligen Spinwerte physikalische Realisierung. Um zum Ausdruck zu bringen, daß wir speziell vom Spin 1/2 reden, ersetzen wir die Bezeichnung des § 1 durch

$$\left.\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}} &\to \vec{\sigma}\,, \\ J &\to s = \frac{1}{2}\,, \\ M &\to m = \pm\frac{1}{2}\,. \end{aligned}\right\} \tag{93}$$

Für die gemeinsamen Eigenvektoren $|u_{\frac{1}{2}}^m\rangle$ von $\vec{\sigma}^2$ und σ_z schreiben wir abkürzend

$$|u_{\frac{1}{2}}^m\rangle = |u^{\pm}\rangle \,.$$

Sie erfüllen also die Eigenwertgleichungen

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{s}^2 \,|u^\pm\rangle &= \frac{3}{4}\,\hbar^2\,|u^\pm\rangle \\ s_z\,|u^\pm\rangle &= \pm\,\frac{\hbar}{2}\,|u^\pm\rangle \end{aligned}} \tag{94}$$

und spannen den zweidimensionalen unitären Raum $\mathfrak{u}_{s=\frac{1}{2}}$ auf.[1]) Ihre Orthonormierung lautet

$$\langle u^\pm \mid u^\pm\rangle = 1, \quad \langle u^\pm \mid u^\mp\rangle = 0. \tag{95}$$

Ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle$ aus $\mathfrak{u}_s$, der irgendeinen Spinzustand beschreibt, ist eine Linearkombination aus $|u^\pm\rangle$,

$$\boxed{|\varphi\rangle = |u^+\rangle\,\varphi^+ + |u^-\rangle\,\varphi^-}\,. \tag{96}$$

Seine Komponenten $\varphi^\pm$ sind die Skalarprodukte

$$\varphi^\pm = \langle u^\pm \mid \varphi\rangle \qquad (s_z\text{-Darstellung}). \tag{97}$$

Die Wahrscheinlichkeit, im Zustand $|\varphi\rangle$ bei einer Messung von s_z die Eigenwerte $\pm\,\frac{\hbar}{2}$ anzutreffen, ist durch

$$w^\pm = |\varphi^\pm|^2 \tag{98}$$

gegeben.

Die Anwendung von $s_\pm = s_x \pm \mathrm{i}\, s_y$ auf die Zustände $|u^\pm\rangle$ ergibt nach Gl. (27)

$$\boxed{\begin{aligned} s_+\,|u^+\rangle &= 0 & s_-\,|u^+\rangle &= \hbar\,|u^-\rangle \\ s_+\,|u^-\rangle &= \hbar\,|u^+\rangle & s_-\,|u^-\rangle &= 0 \end{aligned}}\,. \tag{99}$$

Die Matrixelemente der Spinoperatoren in der s_z-Darstellung lauten daher

$$\left.\begin{aligned} \langle u^m \mid s_+\, u^{m'}\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & \langle u^m \mid s_-\, u^{m'}\rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \langle u^m \mid s_x\, u^{m'}\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \langle u^m \mid s_y\, u^{m'}\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \\ \langle u^m \mid s_z\, u^{m'}\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \langle u^m \mid \vec{s}^2\, u^{m'}\rangle &= \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}\right\} \tag{100}$$

und damit

$$\langle u^m \mid \vec{s}\, u^{m'}\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathfrak{e}_z & \mathfrak{e}_- \\ \mathfrak{e}_+ & -\mathfrak{e}_z \end{pmatrix}, \tag{101}$$

---

[1]) Man beachte: $\vec{s}$ ist ein Vektor im dreidimensionalen Ortsraum, $|u^\pm\rangle$ sind hingegen Vektoren im zweidimensionalen unitären Raum $\mathfrak{u}_{\frac{1}{2}}$!

wobei $\mathfrak{e}_\pm$ die aus den räumlichen Einheitsvektoren gebildeten Linearkombinationen $\mathfrak{e}_x \pm i\mathfrak{e}_y$ sind. Zur Vermeidung der Faktoren $\frac{\hbar}{2}$ verwendet man statt s_i häufig die PAULIschen Spinoperatoren

$$\sigma_i = \frac{2}{\hbar} s_i . \tag{102}$$

Die Matrixelemente von σ_i nennt man *PAULIsche Spinmatrizen.*

Da alle Spinobservablen in dem zweidimensionalen Eigenraum $\mathfrak{u}_{s=\frac{1}{2}}$ von $\vec{s}^2$ wirken, resultieren aus der Gl. (34) für die Operatoren s_+ und s_- die Eigenschaften

$$\boxed{s_+^2 = s_-^2 = \mathcal{O} \text{ für } s = \frac{1}{2}} . \tag{103}$$

Setzen wir hierin den Zusammenhang mit s_x und s_y ein, so folgt

$$s_x^2 \pm i(s_x s_y + s_y s_x) - s_y^2 = \mathcal{O} . \tag{104}$$

Durch Addition dieser beiden Gleichungen erhalten wir

$$s_x^2 = s_y^2 .$$

Weil keine Richtung im Raum ausgezeichnet ist, muß dies auch gleich s_z^2 sein, d. h. $\vec{s}^2 = 3 s_x^2$. Weil andererseits im $\mathfrak{u}_{s=\frac{1}{2}}$ $\vec{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1}$ ist, erhalten wir für Spin 1/2

$$\boxed{s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}} . \tag{105}$$

Subtrahieren wir die beiden Gleichungen (104) voneinander, so ergibt sich $s_x s_y + s_y s_x = \mathcal{O}$ und bei Berücksichtigung der Vertauschungsrelation (1)

$$\boxed{s_x s_y = - s_y s_x = - \frac{\hbar}{2i} s_z, \ \ldots} . \tag{106}$$

Durch „..." ist angedeutet, daß diese Relationen auch bei zyklischer Vertauschung der Indizes x, y, z gültig bleiben, weil keine Raumrichtung ausgezeichnet ist. Durch Kombination der Gl. (105) und (106) erhalten wir schließlich

$$s_x s_y s_z = - \frac{\hbar^3}{8i} \mathbb{1} . \tag{107}$$

Die eben abgeleiteten Gleichungen(103) bis (107) werden insbesondere natürlich von den Matrizen (100) erfüllt, wovon man sich durch explizites Nachrechnen leicht überzeugen kann.

Aufg. 103: a) Wie vereinfacht sich der Drehoperator für einen Spin $s = \frac{1}{2}$?

b) Man bestimme mit Hilfe des Drehoperators die Eigenvektoren von s_x in der s_z-Darstellung.

c) Was ergibt sich damit für das in 3.3 § 5 besprochene Experiment, wenn man es mit Ag-Atomen (Grundzustand $l = 0$, $s = 1/2$) ausführt?

Aufg. 104: Man stelle den statistischen Operator ρ für einen Spin $s = \frac{1}{2}$ durch die Spinoperatoren und ihre Erwartungswerte dar.

§ 5. Das magnetische Moment

Der Bahndrehimpuls eines geladenen Teilchens ist nach dem magneto-mechanischen Parallelismus [Gl. (1.2–88)] mit einem permanenten magnetischen Moment verknüpft. Diese Beziehung übernimmt man in die Quantentheorie und erhält damit für den Operator des Bahnmomentes

$$\boxed{\vec{\mathfrak{m}}_l = \frac{q}{2mc}\,\vec{\ell}}\,. \tag{108}$$

Die nicht gleichzeitige Meßbarkeit der einzelnen Komponenten des Drehimpulses überträgt sich daher auf das magnetische Moment: Man kann nur eine Komponente und den Betrag simultan messen. Die Eigenvektoren sind die $|u_l^m\rangle$ des § 2. Eine Komponente des permanenten magnetischen Momentes $\vec{\mathfrak{m}}_l$ hat daher die $(2l+1)$ Eigenwerte

$$\frac{q\hbar}{2mc}\,m_l \qquad (m_l = l, \ldots, -l)\,. \tag{109}$$

Für *Elektronen* ist $q_{\text{el}} = -e$ (e = positive Elementarladung). Die Größe

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_{\text{el}}c} = 0{,}927 \cdot 10^{-20}\ \text{Gauß cm}^3 \tag{110}$$

nennt man das Bohrsche *Magneton.*

Auch der Spin der Elementarteilchen ist in vielen Fällen[1]) mit einem permanenten magnetischen Moment $\vec{\mathfrak{m}}_s$ verknüpft. Die Proportionalitätskonstante zwischen $\vec{\mathfrak{m}}_s$ und $\vec{\mathfrak{s}}$ ist aber eine andere als in Gl. (108),

$$\boxed{\vec{\mathfrak{m}}_s = g_s\,\frac{q}{2mc}\,\vec{\mathfrak{s}}}\,. \tag{111}$$

Die Zahl g_s nennt man *gyromagnetischen Faktor.* Die Diracsche Theorie liefert für g_s den Wert 2. Die Quantenelektrodynamik gibt hierzu Korrekturglieder in einer Potenzreihe nach der (dimensionslosen) Sommerfeldschen Feinstrukturkonstanten $\alpha = \frac{q^2}{\hbar c} = \frac{1}{137{,}04}$

$$g_s = 2\left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} \cdots\right]. \tag{112}$$

Für *Elektronen* ist dieser Wert durch das Experiment bestens bestätigt. Für *Protonen* und *Neutronen,* die ebenfalls den Spin $s = 1/2$ besitzen, ist hingegen

$$g_s^p = 5{,}59, \quad g_s^n = -3{,}83, \tag{113}$$

wenn man für q die positive Elementarladung e und für m die Protonenmasse m^p einsetzt.[2]) Obwohl also das Neutron keine Ladung besitzt, hat es doch ein

[1]) Photonen und Neutrinos besitzen einen Spin (1 bzw. 1/2), aber haben kein magnetisches Moment.

[2]) Die Größe $\mu_K = \frac{e\hbar}{2\,m^p\,c}$ bezeichnet man als Kernmagneton. Wegen der Masse des Protons ist es rund 1840mal kleiner als μ_B.

magnetisches Moment. Die Ursache liegt in den mesonischen Kernkräften, die wesentlich stärkere „Korrekturen" als die elektromagnetische Wechselwirkung bedingen.

Wir wollen uns überlegen, welchen Effekt das *Spinmoment eines Elektrons* bewirkt. Dazu bringen wir z. B. Ag-Atome, die ein 5s-Elektron ($l = 0$, $s = 1/2$) besitzen (die anderen Elektronen können wir aus der Betrachtung ausschließen, weil sie keinen Drehimpuls haben), in ein Magnetfeld $\mathfrak{B}$. Der HAMILTON-Operator dieses einen Elektrons hat dann die Gestalt

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - (\vec{m}_s \mathfrak{B}). \tag{114}$$

Dabei ist $\mathscr{H}_0$ der HAMILTON-Operator ohne Magnetfeld und $-(\vec{m}_s \mathfrak{B})$ der HAMILTON-Operator des Spinmomentes im Feld. Das Bahnmoment liefert wegen $l = 0$ keinen Beitrag, den diamagnetischen Anteil vernachlässigen wir. Der Operator (114) hat die Eigenvektoren $|u_{\gamma l=0}\rangle\,|u^{\pm}\rangle$, so daß man für die Energie erhält

Fig. 81. Spinenergie im Magnetfeld B

$$E = E_0 \pm \frac{g_s \mu_B}{2} B. \tag{115}$$

Der Eigenwert E_0 (der wegen des Spins ohne Magnetfeld zweifach ist) spaltet im Magnetfeld in zwei Terme mit dem Abstand $g_s \mu_B B$ auf (Fig. 81).

Wir wollen nun noch die *Dynamik* eines Spins im Magnetfeld quantentheoretisch untersuchen. In die Beziehung

$$\mathring{\vec{s}} = \frac{i}{\hbar} [\mathscr{H}_s, \vec{s}] \tag{116}$$

setzen wir den HAMILTON-Operator eines Spins im Magnetfeld

$$\mathscr{H}_s = -\gamma(\vec{s}\, \mathfrak{B}) \qquad \left(\gamma = g_s \frac{q}{2mc}\right) \tag{117}$$

ein. Damit erhalten wir z. B. für die z-Komponente

$$\mathring{s}_z = -\frac{i}{\hbar} \gamma [(\vec{s}\, \mathfrak{B}), s_z].$$

Unter Verwendung der Vertauschungsrelation der Spinoperatoren ergibt sich

$$\mathring{s}_z = \gamma (s_x B_y - s_y B_x) = (\vec{m}_s \times \mathfrak{B})_z$$

und allgemein

$$\boxed{\mathring{\vec{s}} = \vec{m}_s \times \mathfrak{B}}\,. \tag{118}$$

Der Operator der zeitlichen Veränderung des Drehimpulses ist gleich dem Operator des mechanischen Drehmoments, welches das magnetische Moment im Felde erfährt. Bilden wir von dieser Gleichung den Erwartungswert, so liefert das EHRENFESTsche Theorem (3.5–54 oder 3.7–52$_1$)

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{s} \rangle = \langle \vec{m}_s \rangle \times \mathfrak{B} \tag{119}$$

oder, wenn wir das Magnetfeld in die z-Richtung legen,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\sigma_x\rangle = \gamma B\langle\sigma_y\rangle\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\sigma_y\rangle = -\gamma B\langle\sigma_x\rangle\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\sigma_z\rangle = 0\,.$$

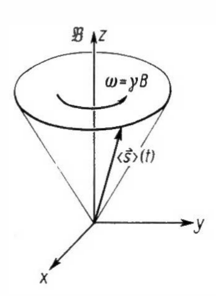


Fig. 82. Präzession des Erwartungswertes $\langle\vec{\sigma}\rangle$ um ein Magnetfeld 𝔅

Dieses Gleichungssystem hat die Lösungen

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle(t) &= \langle\sigma_y\rangle(0)\sin\gamma Bt + \langle\sigma_x\rangle(0)\cos\gamma Bt\,,\\ \langle\sigma_y\rangle(t) &= \langle\sigma_y\rangle(0)\cos\gamma Bt - \langle\sigma_x\rangle(0)\sin\gamma Bt\,,\\ \langle\sigma_z\rangle(t) &= \langle\sigma_z\rangle(0)\,,\end{aligned} \qquad (120)$$

d. h., der Erwartungswert $\langle\vec{\sigma}\rangle$ des Spinvektors präzediert mit der Frequenz γB um das Magnetfeld (Fig. 82). Im stationären Zustand ist $\langle\sigma_x\rangle = \langle\sigma_y\rangle = 0$.

Aufg. 105: Wie groß ist die Übergangswahrscheinlichkeit eines Spins vom Zustand $|u^+\rangle$ nach $|u^-\rangle$, wenn er in ein Wechselfeld $B_x = B_1\cos\omega t$, $B_y = -B_1\sin\omega t$, $B_z = B_0$ gebracht wird?

Aufg. 106: Man berechne für ein System von N unabhängigen Spins $s = \frac{1}{2}$ die Gleichgewichtsmagnetisierung $M(H, T)$.

§ 6. Der Gesamtdrehimpuls eines Elektrons

a) Die Vertauschungsrelationen des Gesamtdrehimpulses $\vec{j}$

Der Gesamtdrehimpuls $\vec{j}$ eines Elektrons ist die vektorielle Summe aus dem Bahndrehimpuls $\vec{\ell}$ und dem Spin $\vec{\sigma}$,

$$\boxed{\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{\sigma}}\,. \qquad (121)$$

Weil der Bahndrehimpuls und der Spin in verschiedenen unitären Räumen wirken, sind alle Komponenten ℓ_i mit allen Komponenten σ_k vertauschbar,

$$\boxed{[\ell_i, \sigma_k] = \mathcal{O}}\,. \qquad (122)$$

Damit ergibt sich für den Gesamtdrehimpuls $\vec{j}$ die Vertauschungsrelation

$$[j_x, j_y] = [\ell_x + \sigma_x, \ell_y + \sigma_y] = [\ell_x, \ell_y] + [\sigma_x, \sigma_y] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\ell_z + \sigma_z) = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,j_z\,.$$

Entsprechende Gleichungen erhält man durch zyklische Vertauschung der Indizes x, y, z. Damit ist gezeigt, daß die Summe (121) in der Tat ein Drehimpulsoperator ist.[1]) Für den Betrag $\vec{j}^2$ gilt wieder

$$[\vec{j}^2, j_i] = \mathcal{O}. \tag{123}$$

Durch ähnliche Rechnungen verifiziert man leicht die Gültigkeit der folgenden Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\vec{l}^2, j_i] &= \mathcal{O}, \quad [\vec{s}^2, j_i] = \mathcal{O}, \\ [\vec{l}^2, \vec{j}^2] &= \mathcal{O}, \quad [\vec{s}^2, \vec{j}^2] = \mathcal{O}. \end{aligned} \tag{124}$$

Die gemeinsamen Eigenvektoren von $\vec{j}^2$ und j_z sind gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{l}^2$ und $\vec{s}^2$, sie gehören zu festen Eigenwerten l und s. — Durch Quadrieren von Gl. (121) erhält man

$$\vec{j}^2 = \vec{l}^2 + \vec{s}^2 + 2\,\vec{l}\,\vec{s}, \tag{125}$$

so daß wegen der letzten beiden Gln. (124) also auch das Skalarprodukt $\vec{l}\,\vec{s}$ mit $\vec{j}^2$ vertauscht,

$$[\vec{j}^2, \vec{l}\,\vec{s}] = \mathcal{O}. \tag{126}$$

b) Die Gesamtdrehimpuls-Eigenzustände eines Elektrons. Wigner-Koeffizienten

Die simultanen Eigenvektoren $|u_j^m\rangle$ von $\vec{j}^2$ und j_z des Gesamtdrehimpulses eines Elektrons,

$$\begin{aligned} \vec{j}^2\, |u_j^m\rangle &= j(j+1)\,\hbar^2\, |u_j^m\rangle, \\ j_z\, |u_j^m\rangle &= m\hbar\, |u_j^m\rangle, \end{aligned} \tag{127}$$

liegen in dem Produktraum

$$\mathfrak{u}_l \times \mathfrak{u}_{\frac{1}{2}}. \tag{128}$$

Diese wollen wir jetzt aufsuchen. Als Basisvektoren des Produktraumes verwenden wir die Produkte aus Bahndrehimpuls- und Spinvektoren

$$|u_l^{m_l} u^{m_s}\rangle = |u_l^{m_l}\rangle\, |u_{\frac{1}{2}}^{m_s}\rangle. \tag{129}$$

Die Entwicklung der Gesamtdrehimpuls-Eigenvektoren lautet daher

$$\boxed{|u_j^m\rangle = \sum_{m_l m_s} |u_l^{m_l} u^{m_s}\rangle\, C^{m_l m_s}}. \tag{130}$$

---

[1]) Für eine beliebige Linearkombination $\alpha\,\vec{l} + \beta\,\vec{s}$ gilt dies nicht mehr. Zum Beispiel erfüllt das Gesamtmoment $\vec{m} \sim \vec{l} + 2\,\vec{s}$ nicht die Drehimpulsvertauschungsrelationen.

Wenden wir hierauf $j_z = \ell_z + s_z$ an, so erhalten wir

$$m\,|u_j^m\rangle = \sum_{m_l m_s} (m_l + m_s)\,|u_l^{m_l} u^{m_s}\rangle\, C^{m_l m_s}$$

oder

$$\sum_{m_l m_s} (m - m_l - m_s)\,|u_l^{m_l} u^{m_s}\rangle\, C^{m_l m_s} = 0 .$$

Multiplizieren wir diese Gleichung mit $\langle u_l^{m'_l}\, u^{m'_s}|$, so folgt aus der Orthogonalität

$$(m - m_l - m_s)\, C^{m_l m_s} = 0 .$$

Für $m \neq m_l + m_s$ muß also $C^{m_l m_s}$ verschwinden. Wir können daher in Gl. (130) m_l durch $m - m_s$ ersetzen und brauchen dann nur mehr über die beiden Spin-einstellmöglichkeiten $+$ und $-$ zu summieren,

$$\boxed{|u_j^m\rangle = |u_l^{m-\frac{1}{2}}\, u^+\rangle\, C^+ + |u_l^{m+\frac{1}{2}}\, u^-\rangle\, C^-} . \tag{131}$$

Die noch verbleibende Aufgabe ist, die Konstanten C^+ und C^- (WIGNER-*Koeffizienten*) zu berechnen. Dazu multiplizieren wir mit

$$\vec{j}^{\,2} = \vec{\ell}^{\,2} + \vec{s}^{\,2} + \ell_+ s_- + \ell_- s_+ + 2\,\ell_z s_z$$

und erhalten bei Berücksichtigung von Gl. (27), wenn wir zur Abkürzung $|v^+\rangle = |u_l^{m-\frac{1}{2}}\, u^+\rangle$ und $|v^-\rangle = |u_l^{m+\frac{1}{2}}\, u^-\rangle$ setzen,

$$\begin{aligned} j(j+1)\,(|v^+\rangle\, C^+ + |v^-\rangle\, C^-) = {} & \left[l(l+1) + \frac{3}{4}\right] (|v^+\rangle\, C^+ + |v^-\rangle\, C^-) \\ & + \sqrt{l(l+1) - \left(m - \frac{1}{2}\right)\left(m + \frac{1}{2}\right)}\; |v^-\rangle\, C^+ \\ & + \sqrt{l(l+1) - \left(m + \frac{1}{2}\right)\left(m - \frac{1}{2}\right)}\; |v^+\rangle\, C^- \\ & + \left(m - \frac{1}{2}\right) |v^+\rangle\, C^+ - \left(m + \frac{1}{2}\right) |v^-\rangle\, C^- . \end{aligned}$$

Die WIGNER-Koeffizienten C^+ und C^- erfüllen also das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} - m + \frac{1}{2}\right] C^+ - \sqrt{l(l+1) - m^2 + \frac{1}{4}}\; C^- &= 0, \\ -\sqrt{l(l+1) - m^2 + \frac{1}{4}}\; C^+ + \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} + m + \frac{1}{2}\right] C^- &= 0 . \end{aligned} \tag{132}$$

Dieses hat nur dann von Null verschiedene Lösungen, falls die Determinante ihrer Koeffizienten verschwindet. Diese Bedingung führt auf

$$j(j+1) = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \pm \left(l + \frac{1}{2}\right),$$

d. h., die Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl j eines Elektrons kann nur die beiden Werte

$$\boxed{j = l + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad j = l - \frac{1}{2}} \quad (l \neq 0) \tag{133}$$

annehmen.

Im Fall $j = l + \frac{1}{2}$ genügen damit die WIGNER-Koeffizienten der Gleichung

$$\sqrt{l + \frac{1}{2} - m}\; C^+ - \sqrt{l + \frac{1}{2} + m}\; C^- = 0,$$

d. h.

$$C^+ = N\sqrt{l + \frac{1}{2} + m}\,, \qquad C^- = N\sqrt{l + \frac{1}{2} - m}\,.$$

Den Faktor N erhalten wir aus der Normierungsbedingung

$$|C^+|^2 + |C^-|^2 = |N|^2(2l + 1) = 1,$$

also ist

$$\boxed{C^+_{j=l+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \qquad C^-_{j=l+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}}\,. \tag{134}$$

Das Vorzeichen der Wurzel ist entsprechend der üblichen Konvention positiv gewählt worden [man kann für irgendeinen m-Wert die Phase willkürlich wählen, für alle anderen sind dann die Phasen durch Anwendung der Operatoren $\mathscr{j}_\pm$ auf Gl. (131) festgelegt]. Einige aus Gl. (134) folgende Eigenvektoren seien explizit angeschrieben

$$\left| u^{m=l+\frac{1}{2}}_{j=l+\frac{1}{2}} \right\rangle = |u_l^l u^+\rangle,$$

$$\left| u^{m=l-\frac{1}{2}}_{j=l+\frac{1}{2}} \right\rangle = |u_l^{l-1} u^+\rangle \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} + |u_l^l u^-\rangle \sqrt{\frac{1}{2l+1}},$$

$$\left| u^{m=l-\frac{3}{2}}_{j=l+\frac{1}{2}} \right\rangle = |u_l^{l-2} u^+\rangle \sqrt{\frac{2l-1}{2l+1}} + |u_l^{l-1} u^-\rangle \sqrt{\frac{2}{2l+1}},$$

$$\vdots$$

In analoger Weise erhält man für $j = l - \frac{1}{2}$ die Koeffizienten

$$\boxed{C^+_{j=l-\frac{1}{2}} = -\sqrt{\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \qquad C^-_{j=l-\frac{1}{2}} = +\sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}} \tag{135}$$

und damit als Eigenvektoren die Linearkombinationen

$$\left| u_{j=l-\frac{1}{2}}^{m=l-\frac{1}{2}} \right\rangle = - |u_l^{l-1} u^+\rangle \sqrt{\frac{1}{2l+1}} + |u_l^l u^-\rangle \sqrt{\frac{2l}{2l+1}},$$

$$\left| u_{j=l-\frac{1}{2}}^{m=l-\frac{3}{2}} \right\rangle = - |u_l^{l-2} u^+\rangle \sqrt{\frac{2}{2l+1}} + |u_l^{l-1} u^-\rangle \sqrt{\frac{2l-1}{2l+1}},$$

$$\vdots$$

c) Die Spin-Bahn-Wechselwirkung

Das bewegte magnetische Spinmoment eines Elektrons ist mit einem elektrischen Moment verknüpft, das mit dem elektrischen Feld des Atomkernes wechselwirkt. Aus der Relativitätstheorie folgt, daß für Teilchengeschwindigkeiten, die nicht in der Größenordnung der Lichtgeschwindigkeit liegen, die zugehörige Wechselwirkungsenergie lautet

$$\mathscr{H}_{ls} = \frac{1}{m^2 c^2 2 r} \frac{1}{r} \frac{d\mathscr{V}(r)}{dr} \vec{l}\, \vec{s}. \tag{136}$$

Sie bewirkt eine Kopplung zwischen dem Spin und dem Bahndrehimpuls des Elektrons (*Spin-Bahn-Kopplung*). Der gesamte HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2} + \mathscr{V}(r) + \mathscr{H}_{ls} \tag{137}$$

vertauscht nicht mehr mit $\vec{l}$ und $\vec{s}$ getrennt, wohl aber nach Gl. (124) und (125) mit $\vec{j}$. Daher besitzen $\mathscr{H}$, $\vec{j}^{\,2}$ und j_z gemeinsame Eigenvektoren $|u_{Ej}^m\rangle$. Die Winkel- und Spinabhängigkeit der Eigenfunktionen ist also durch Gl. (131) gegeben. Für $E < 0$ liefert die radiale Gleichung die $(2j+1)$-fachen Eigenwerte $E_{nj=l\pm\frac{1}{2}}$. Die aus einem Eigenwert E_{nl} $(l \neq 0)$ entstehenden zwei Terme äußern sich in der ***Feinstruktur der Spektrallinien.***

§ 7. Die Addition zweier beliebiger Drehimpulse

Die vorstehenden Überlegungen lassen sich auf den Fall erweitern, daß irgend zwei Drehimpulse $\vec{\mathscr{J}}_1$ und $\vec{\mathscr{J}}_2$ zum Gesamtimpuls

$$\vec{\mathscr{J}} = \vec{\mathscr{J}}_1 + \vec{\mathscr{J}}_2 \tag{138}$$

zusammengefügt werden. Man kann wieder von den Produktzuständen $|u_{J_1}^{M_1} u_{J_2}^{M_2}\rangle$ der einzelnen Drehimpulse ausgehen, die den Produktraum

$$\mathfrak{U}_{J_1} \times \mathfrak{U}_{J_2} \tag{139}$$

aufspannen. Weil $\vec{\mathscr{J}}^{\,2}$ mit $\mathscr{J}_z$, $\vec{\mathscr{J}}_1^{\,2}$ und $\vec{\mathscr{J}}_2^{\,2}$ vertauscht, sind die Eigenvektoren $|u_J^M\rangle$ des zusammengesetzten Drehimpulses Linearkombinationen (J_1, J_2 fest)

$$|u_J^M\rangle = \sum_{M_1 M_2} |u_{J_1}^{M_1} u_{J_2}^{M_2}\rangle\, C_{J_1 J_2 J}^{M_1 M_2 M}. \tag{140}$$

Durch Anwendung der Operatoren $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ läßt sich zeigen, daß die WIGNER-Koeffizienten

$$C_{J_1 J_2 J}^{M_1 M_2 M} = \langle u_{J_1}^{M_1} u_{J_2}^{M_2} \mid u_J^M \rangle \tag{141}$$

nur für

$$\boxed{\begin{aligned} M &= M_1 + M_2 \\ J &= J_1 + J_2,\quad J_1 + J_2 - 1, \ldots, |J_1 - J_2| \end{aligned}} \tag{142}$$

von Null verschieden sind. Diese Additionsbeziehung der Drehimpulse folgt unmittelbar aus der Ausreduktion der Produktdarstellung $\Gamma_{J_1} \times \Gamma_{J_2}$ der Drehgruppe in die irreduziblen Bestandteile, was im Anhang 5.4 § 7 durchgeführt wird. Die WIGNER-Koeffizienten bilden die ausreduzierende Matrix. Ohne Beweis sei hier ihr allgemeiner Ausdruck angegeben:

$$\begin{aligned} C_{J_1 J_2 J}^{M_1 M_2 M} &= \sqrt{2J+1}\sqrt{\frac{(J_1+J_2-J)!\,(J+J_2-J_1)!\,(J+J_1-J_2)!}{(J_1+J_2+J+1)!}} \\ &\times \sqrt{(J+M)!\,(J-M)!\;(J_1+M_1)!\,(J_1-M_1)!\;(J_2+M_2)!\,(J_2-M_2)!} \\ &\times \sum_\nu \frac{(-1)^\nu}{\nu!\,(J_1+J_2-J-\nu)!\,(J_1-M_1-\nu)!\,(J_2+M_2-\nu)!\,(J-J_2+M_1+\nu)!\,(J-J_1-M_2+\nu)!} \end{aligned} \tag{143}$$

Rekursionsformeln für die WIGNER-Koeffizienten finden sich in den ausführlichen Büchern über die Quantentheorie des Drehimpulses (z. B. ROSE, l. c.).

Die Drehimpulsaddition bildet das Fundament für die Klassifikation der Energieterme von Atomen und Kernen, weil die zugrunde liegenden, kugelsymmetrischen HAMILTON-Operatoren mit dem Gesamtdrehimpulsoperator vertauschen und damit die Energieeigenvektoren auch Eigenvektoren des Gesamtdrehimpulses sind (vgl. Aufg. 110).

Aufg. 107: Wie lauten die Eigenwerte und Eigenvektoren eines aus zwei Spins ($s = 1/2$) zusammengesetzten Spins?

Viertes Kapitel

Permutationen

§ 1. Die Austauschentartung und ihre (teilweise) Aufhebung durch eine symmetrische Wechselwirkung

a) Zwei Teilsysteme

Als Beispiel einer Systemzusammensetzung wurden in 3.4 § 3 zwei wechselwirkende Systeme (1) und (2) mit dem HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H}^{12} = \hbar^1 + \hbar^2 + \hbar^{12} \tag{1}$$

untersucht. Nunmehr wollen wir uns dem speziellen Fall zuwenden, in dem die Teil-HAMILTON-Operatoren $\mathscr{h}^1$ und $\mathscr{h}^2$ die *gleiche Form* besitzen und die Wechselwirkung $\mathscr{h}^{12}$ *symmetrisch* in (1) und (2) ist. Wir denken dabei z. B. an zwei gleiche Spins im gleichen Magnetfeld, die durch die Wechselwirkungsenergie ihrer magnetischen Momente (Spin-Spin-Wechselwirkung) korreliert sind, oder an die Bahnbewegung zweier Elektronen (ohne Spinberücksichtigung), die durch ihre COULOMBsche Wechselwirkung beeinflußt wird.[1])

Weil die HAMILTON-Operatoren $\mathscr{h}^1$ und $\mathscr{h}^2$ dieselben Operatorfunktionen sein sollen, sind ihre Energieniveaus und Energieeigenvektoren *gleich*,

$$\mathscr{h}^1 \, |u_a^1\rangle = \varepsilon_a \, |u_a^1\rangle, \quad \mathscr{h}^2 \, |u_a^2\rangle = \varepsilon_a \, |u_a^2\rangle. \tag{2}$$

$|u_a^1\rangle$ sind Vektoren im unitären Raum $\mathfrak{U}^1$ des Systems (1) und $|u_a^2\rangle$ solche im $\mathfrak{U}^2$ von (2). Die unteren Indizes mögen die verschiedenen Energiezustände numerieren. Von einer Entartung der Energien sehen wir der Einfachheit halber ab.

Jede Verteilung der beiden Systeme (1) und (2) auf ihre möglichen Energieniveaus ergibt nach Gl. (3.4–15) die Energien des Gesamtsystems ohne Wechselwirkung (Fig. 83),

$$\mathscr{H}_0^{12} = \mathscr{h}^1 + \mathscr{h}^2. \tag{3}$$

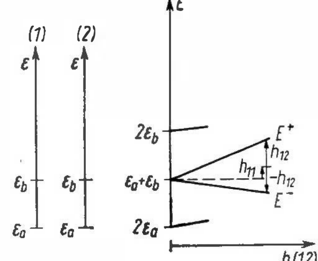


Fig. 83. Aufhebung der Austauschentartung durch eine Wechselwirkung $\mathscr{h}^{12}$

Es sind zwei Fälle zu unterscheiden:

1. Die Systeme (1) und (2) befinden sich beide im *gleichen* Zustand $|u_a\rangle$. Dann ist

$$\boxed{E_0 = 2\varepsilon_a \quad \text{mit} \quad |u_{E_0}\rangle = |u_a^1 u_a^2\rangle}. \tag{4}$$

E_0 ist einfach (sofern es die ε_a waren).

2. Die Systeme (1) und (2) befinden sich in *verschiedenen* Zuständen $|u_a\rangle$ und $|u_b\rangle$. Die Gesamtenergie $E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b$ kann auf zwei verschiedene Weisen realisiert werden: Entweder dadurch, daß das System (1) im Zustand $|u_a\rangle$ und das System (2) im Zustand $|u_b\rangle$ ist, oder daß sich (1) im Zustand $|u_b\rangle$ und (2) im Zustand $|u_a\rangle$ befindet. Die Energie E_0 ist in diesem Fall entartet, es gehören zu ihr alle Linearkombinationen der Produktvektoren

$$|u_1\rangle = |u_a^1 u_b^2\rangle \quad \text{und} \quad |u_2\rangle = |u_b^1 u_a^2\rangle;$$

$$\boxed{E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b \quad \text{mit} \quad |u_{E_0}\rangle = c_1 \, |u_a^1 u_b^2\rangle + c_2 \, |u_b^1 u_a^2\rangle}. \tag{5}$$

[1]) Die vollständige Behandlung zweier Elektronen mit Spinberücksichtigung müssen wir wegen des noch zu besprechenden PAULI-Prinzips auf das nächste Kapitel verschieben. Dort werden wir sehen, wie man aus den Bahn- und Spineigenvektoren die richtigen Gesamtzustände zweier Elektronen aufbaut (Aufg. 110).

Diese Entartung der Gesamtenergie, die durch das Vertauschen der Systeme (1) und (2) zustande kommt, nennt man „*Austauschentartung*".

Nun wenden wir uns dem Eigenwertproblem des Gesamt-HAMILTON-Operators $\mathcal{H}^{12}$ zu. Der Einfluß der in (1) und (2) symmetrischen Störung

$$\mathscr{h}^{12} = \mathscr{h}^{21} \tag{6}$$

wird mittels SCHRÖDINGERscher Störungstheorie (Kap. 5.3) behandelt. Der nichtentartete Term (4) erfährt durch die Wechselwirkung eine Energieverschiebung, die wir nicht näher verfolgen wollen. Wesentlich interessanter ist das Verhalten des entarteten Terms (5). Durch die Wirkung von $\mathscr{h}^{12}$ erleidet er eine *Aufspaltung*, die man in erster Näherung aus der Störungstheorie entarteter Terme (5.3 § 3) durch die Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} h_{11} - E & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} - E \end{vmatrix} = 0 \tag{7}$$

erhält. Die darin auftretenden Matrixelemente der Störung $\mathscr{h}^{12}$ sind mit den ungestörten, entarteten Zuständen $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ zu bilden. Das Matrixelement

$$\boxed{h_{11} = \langle u_1 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_1\rangle = \langle u_a^1 u_b^2 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_a^1 u_b^2\rangle} \tag{8}$$

nennt man *Wechselwirkungsintegral*. Für

$$h_{22} = \langle u_2 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_2\rangle = \langle u_b^1 u_a^2 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_b^1 u_a^2\rangle$$

erhält man durch Vertauschen der Numerierung der Teilsysteme ($1 \leftrightarrow 2$) $\langle u_b^2\, u_a^1 \mid \mathscr{h}^{21}\, u_b^2\, u_a^1\rangle$. Berücksichtigt man jetzt, daß die Reihenfolge der Faktoren im direkten Produkt gleichgültig ist [Gl. (2.4-1)], und beachtet man außerdem die Symmetrie (6), so ergibt sich $\langle u_a^1\, u_b^2 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_a^1\, u_b^2\rangle$, also

$$h_{22} = h_{11}. \tag{9}$$

Für die Nichtdiagonalelemente

$$\boxed{h_{12} = \langle u_1 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_2\rangle = \langle u_a^1 u_b^2 \mid \mathscr{h}^{12}\, u_b^1 u_a^2\rangle}\,, \tag{10}$$

die man *Austauschenergie* oder *Austauschintegral* nennt, findet man durch eine analoge Überlegung

$$h_{21} = h_{12}. \tag{11}$$

Durch die Gl. (9) und (11) vereinfacht sich die Säkulargleichung (7) zu

$$(h_{11} - E)^2 - h_{12}^2 = 0$$

oder

$$E = h_{11} \pm h_{12}, \tag{12}$$

d. h., die Austauschentartung (5) *wird durch die Wechselwirkung* $\mathscr{h}^{12}$ *aufgehoben. Der Term* E_0 *spaltet in zwei Terme auf, die in erster Näherung auf beiden Seiten*

von $\varepsilon_a + \varepsilon_b + h_{11}$ *im Abstand* h_{12} *liegen* (Fig. 83, S. 319),

$$\boxed{E^{\pm} \approx \varepsilon_a + \varepsilon_b + h_{11} \pm h_{12}}\,. \tag{13}$$

Die Aufspaltung ist also gleich der doppelten Austauschenergie.

Die zugehörigen Eigenvektoren sind in nullter Näherung die der symmetrischen Störung $\mathscr{h}^{12}$ angepaßten Linearkombinationen

$$|u\rangle = A_1\,|u_1\rangle + A_2\,|u_2\rangle,$$

wobei das Verhältnis der Koeffizienten A nach der Störungstheorie [Gl. (5.3–25)] gegeben ist durch

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{E - h_{11}}{h_{12}} = \pm 1,$$

d. h.

$$|u^{\pm}\rangle = A^{\pm}\,(|u_1\rangle \pm |u_2\rangle).$$

Der Faktor $A^{\pm}$ bestimmt sich aus der Normierung

$$1 = \langle u^{\pm}\,|\,u^{\pm}\rangle = |A^{\pm}|^2\,(\langle u_1\,|\,u_1\rangle + \langle u_2\,|\,u_2\rangle) = 2\,|A^{\pm}|^2$$

zu $A^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Damit lauten also die zu den Eigenwerten $E^{\pm}$ gehörigen Eigenvektoren von $\mathscr{H}$ in nullter Näherung

$$\boxed{|u^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(|u_a^1 u_b^2\rangle \pm |u_b^1 u_a^2\rangle)}\,. \tag{14}$$

$|u^-\rangle$ läßt sich auch als Determinante

$$|u^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |u_a^1\rangle & |u_a^2\rangle \\ |u_b^1\rangle & |u_b^2\rangle \end{vmatrix} \tag{14$^-$}$$

schreiben. $|u^+\rangle$ ist *symmetrisch,* $|u^-\rangle$ *antimetrisch gegenüber einer Teilchenvertauschung.* Diese Symmetrie bzw. Antimetrie bleibt bei beliebig großer, symmetrischer Wechselwirkung bestehen, denn diese wirkt auf beide Systeme nach demselben Gesetz und führt daher symmetrische Zustände wieder in symmetrische und entsprechend antimetrische wieder in antimetrische über (vgl. 3. 6 § 7 b).

Die Superposition der Eigenzustände

$$\begin{aligned} |\Phi^S(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u^+\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E^+t} + |u^-\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E^-t}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E^+t}\left(|u^+\rangle + |u^-\rangle\, e^{\frac{i}{\hbar}2h_{12}t}\right) \end{aligned} \tag{15}$$

ist eine Lösung der Bewegungsgleichung (3.5-75 S). Zur Zeit $t = 0$ herrscht die Anfangssituation

$$|\Phi^S(0)\rangle = |u_1\rangle = |u_a^1 u_b^2\rangle,$$

d. h., das System (1) ist im Zustand $|u_a\rangle$ und das System (2) in $|u_b\rangle$. Nach der Zeit $t = \pi\hbar/2h_{12}$ hingegen wird

$$\left|\Phi^S\left(\frac{\pi\hbar}{2h_{12}}\right)\right\rangle = e^{i\mu}\,|u_2\rangle = e^{i\mu}\,|\overset{1}{u}_b\overset{2}{u}_a\rangle,$$

das System (2) ist jetzt im Zustand $|u_a\rangle$ und (1) in $|u_b\rangle$. Das System pendelt also im Laufe der Zeit zwischen den Zuständen $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ hin und her. Die Größe $2h_{12}/\hbar$ hat die Bedeutung einer *Austauschfrequenz.*

b) N Teilsysteme

Besteht das zusammengesetzte System aus N Teilsystemen, von denen jedes unter dem Einfluß desselben HAMILTON-Operators $\mathscr{h}$ steht,

$$\mathscr{h}^\nu\,|\overset{\nu}{u}_a\rangle = \varepsilon_a\,|\overset{\nu}{u}_a\rangle \qquad (\nu = 1, \ldots, N) \tag{16}$$

(ν numeriert die Teilsysteme, a die verschiedenen Energiezustände; von einer Entartung der ε_a sehen wir wieder ab), so hat der Gesamt-HAMILTON-Operator ohne Wechselwirkung zwischen den Teilsystemen,

$$\mathscr{H}_0 = \sum_{\nu=1}^{N} \mathscr{h}^\nu, \tag{17}$$

im Produktraum

$$\mathfrak{U}_N = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \times \cdots \times \mathfrak{U}^N \tag{18}$$

zum Eigenwert

$$E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \cdots + \varepsilon_n \tag{19}$$

den Eigenvektor

$$|u_1\rangle = |\overset{1}{u}_a\overset{2}{u}_b \ldots \overset{N}{u}_n\rangle, \tag{20_1}$$

d. h., das System (1) ist im Zustand $|u_a\rangle$, das System (2) in $|u_b\rangle$, ... das System (N) in $|u_n\rangle$. Jede andere Verteilung der Systeme auf diese Zustände ist aber ebenfalls Eigenvektor von $\mathscr{H}_0$ zum Eigenwert E_0, z. B.

$$|u_2\rangle = |\overset{2}{u}_a\overset{1}{u}_b \ldots \overset{N}{u}_n\rangle = |\overset{1}{u}_b\overset{2}{u}_a \ldots \overset{N}{u}_n\rangle. \tag{20_2}$$

Durch Permutationen der N Zahlen $a, b, \ldots, n$ erhält man insgesamt $N!$ Eigenvektoren zum Eigenwert E_0, wenn die Zahlen $a, b, \ldots, n$ alle verschieden sind. Sind sie nicht alle verschieden, sondern zerfallen sie in Gruppen von je $N_1, N_2, \ldots$ einander gleiche Zahlen ($N_1 + N_2 + \cdots = N$), so erhält man durch die Permutationen nur

$$t = \frac{N!}{N_1!\,N_2!\ldots} \tag{21}$$

verschiedene Eigenvektoren

$$|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_t\rangle \tag{22}$$

zu dem Eigenwert E_0. Seine Austauschentartung ist also t-fach.[1]) Jede Linear-

[1]) Befinden sich im besonderen alle Systeme im gleichen Zustand $|u_a\rangle$, so gehört zu E_0 nur *ein* Eigenvektor $\left(t = \frac{N!}{N!} = 1\right)$.

kombination

$$|u_{E_0}\rangle = \sum_{\gamma=1}^{t} c_\gamma \, |u_\gamma\rangle \tag{23}$$

ist ebenfalls Eigenvektor zu E_0.

Schaltet man eine zwischen allen N Systemen *symmetrische Wechselwirkung* ein, so wird die Austauschentartung zum Teil aufgehoben, der Energieterm E_0 spaltet in eine Reihe von Termen auf. Diese Aufspaltung könnte man wieder störungstheoretisch untersuchen. Für größere Entartung ist diese Rechnung jedoch praktisch undurchführbar. Die in 3.6 § 7 skizzierte gruppentheoretische Methode gibt jedoch Auskunft über die Anzahl und Vielfachheit der entstehenden Terme: Der Energieeigenwert ohne Wechselwirkung gehört zu einer reduziblen Darstellung der Permutationsgruppe (vgl. Anhang Kap. 5.4) der N Systeme. Durch die Wechselwirkung spaltet er in Energieterme, die zu irreduziblen Darstellungen gehören, auf. Wir wollen diese Ausreduktion in der Aufg. 108 ausführen. Das Ergebnis ist:

1. Es entsteht *ein* nichtentarteter Term E^+, dessen Eigenvektor $|u^+\rangle$ symmetrisch gegenüber einer Permutation der Teilsysteme ist. In nullter Näherung ist dieser gleich der Summe über alle Eigenvektoren (22),

$$|u^+\rangle = c \sum_{\gamma=1}^{t} |u_\gamma\rangle. \tag{24}$$

2. Wenn sich die Teilsysteme alle in verschiedenen Zuständen $|u_a\rangle, |u_b\rangle, \ldots, |u_n\rangle$ befinden, entsteht *ein weiterer, nichtentarteter* Term E^-, dessen Eigenvektor $|u^-\rangle$ antimetrisch ist, d. h., er verändert sein Vorzeichen, wenn man irgend zwei Teilsysteme vertauscht. In nullter Näherung läßt er sich als Determinante

$$|u^-_{ab\ldots n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |u_a^1\rangle & |u_a^2\rangle \ldots |u_a^N\rangle \\ |u_b^1\rangle & |u_b^2\rangle \ldots |u_b^N\rangle \\ \vdots & \\ |u_n^1\rangle & |u_n^2\rangle \ldots |u_n^N\rangle \end{vmatrix} \tag{25}$$

in den Einzelzuständen schreiben.

3. Alle weiteren entstehenden Terme E^i sind mindestens zweifach entartet.

§ 2. Permutationsoperatoren

Zur mathematischen Beschreibung der Vertauschungen gleicher Systeme ist es nötig, Permutationsoperatoren im unitären Raum einzuführen. Wir besprechen sie zunächst für zwei Teilsysteme und erweitern dann die Definition auf N Systeme.

a) Zwei Teilsysteme

Die Observablen eines aus zwei Teilsystemen zusammengesetzten Systems sind durch Operatoren $\mathscr{L}^{12}$, z. B. $\mathscr{L}(\vec{x}^1, \vec{p}^1, \vec{s}^1; \vec{x}^2, \vec{p}^2, \vec{s}^2)$ gegeben. Wir definieren einen unitären Permutationsoperator $\mathscr{P}_{(12)}$[1]) durch die Gleichung

$$\boxed{\mathscr{P}_{(12)} \mathscr{L}^{12} \mathscr{P}^{\dagger}_{(12)} = \mathscr{L}^{21}}. \tag{26}$$

Er vertauscht also die Teilsysteme (1) und (2). Wir haben hier wieder ein einfaches Beispiel für eine *Gruppe von Transformationen* (3.6 § 3) vor uns: Sie besteht aus der identischen Transformation und der Permutation (12) [Gruppe S_2 der Permutationen zweier Systeme (Kap. 5.4)]. Die zweimalige Anwendung der Permutation (12) erzeugt wieder die ursprüngliche Situation, daher ist

$$\mathscr{P}^2_{(12)} = 1\!\!1, \tag{27}$$

d. h., neben der Unitarität besteht in diesem Fall gleichzeitig die HERMITEizität,

$$\mathscr{P}^{\dagger}_{(12)} = \mathscr{P}^{-1}_{(12)} = \mathscr{P}_{(12)}. \tag{28}$$

Betrachtet man als spezielle Observable den Projektionsoperator auf irgendeinen direkten Produktzustand $|v^1_k v^2_l\rangle$,

$$\mathscr{L} = |v^1_k v^2_l\rangle \langle v^1_k v^2_l|,$$

so ergibt Gl. (26)

$$|\mathscr{P}_{(12)} v^1_k v^2_l\rangle \langle \mathscr{P}_{(12)} v^1_k v^2_l| = |v^2_k v^1_l\rangle \langle v^2_k v^1_l|.$$

Weil aber im direkten Produkt die Reihenfolge der Faktoren gleichgültig ist, $|v^2_k v^1_l\rangle = |v^1_l v^2_k\rangle$ erhalten wir — bis auf einen Phasenfaktor, den wir eins setzen —,

$$\boxed{\mathscr{P}_{(12)} |v^1_k v^2_l\rangle = |v^1_l v^2_k\rangle}, \tag{29}$$

d. h., der Permutationsoperator $\mathscr{P}_{(12)}$ macht aus einem Zustand, in dem das System (1) in $|v_k\rangle$ und das System (2) in $|v_l\rangle$ ist, den Zustand, in dem sich (1) in $|v_l\rangle$ und (2) in $|v_k\rangle$ befindet. Für die symmetrischen bzw. antimetrischen Zustände $|u^+\rangle$ bzw. $|u^-\rangle$ der Gl. (14) gilt also

$$\mathscr{P}_{(12)} |u^{\pm}\rangle = \pm |u^{\pm}\rangle. \tag{30}$$

Aus einem beliebigen Vektor, der in der Basis $|v^1_k v^2_l\rangle$ die Komponenten $\langle v^1_k v^2_l | \Phi\rangle = \Phi(k, l)$ besitzt, entsteht durch Anwendung des Permutationsoperators $\mathscr{P}_{(12)}$ ein Vektor $|\mathscr{P}_{(12)} \Phi\rangle$, dessen Komponenten durch

$$\langle v^1_k v^2_l | \mathscr{P}_{(12)} \Phi\rangle = \langle \mathscr{P}_{(12)} v^1_k v^2_l | \Phi\rangle = \langle v^1_l v^2_k | \Phi\rangle = \Phi(l, k) \tag{31}$$

gegeben sind.

---

[1]) Man verwechsle die Permutationsoperatoren $\mathscr{P}_{(\ldots)}$ nicht mit den Projektionsoperatoren $\mathscr{P}_{|u\rangle}$!

Eine Observable $\mathscr{L}$ ist *symmetrisch* gegenüber der Vertauschung $1 \leftrightarrow 2$, wenn $\mathscr{L}^{12} = \mathscr{L}^{21}$ ist, d. h. nach Gl. (26), wenn $\mathscr{L}$ mit $\mathscr{P}_{(12)}$ *vertauscht*,

$$\boxed{[\mathscr{L}, \mathscr{P}_{(12)}] = \mathcal{O}}\ ; \tag{32}$$

z. B. genügt der HAMILTON-Operator (1) dieser Beziehung.

b) N Teilsysteme

Für N Systeme gibt es $N!$ Permutationen (wenn man die identische Permutation, bei der keine Vertauschung gemacht wird, mitrechnet) und damit $N!$ unitäre Permutationsoperatoren $\mathscr{P}_\varrho$ $(\varrho = 1, 2, \ldots, N!)$ [Gruppe S_N (Kap. 5. 4)].

Zum Beispiel für $N = 3$:

	beschreibt die Vertauschung
$\mathscr{P}_{(1)(2)(3)} = 1$	$1 \to 1,\ 2 \to 2,\ 3 \to 3$
$\mathscr{P}_{(123)}$	$1 \to 2 \to 3 \to 1$ [1]
$\mathscr{P}_{(132)}$	$1 \to 3 \to 2 \to 1$
$\mathscr{P}_{(12)(3)}$	$1 \to 2 \to 1,\ 3 \to 3$
$\mathscr{P}_{(13)(2)}$	$1 \to 3 \to 1,\ 2 \to 2$
$\mathscr{P}_{(23)(1)}$	$2 \to 3 \to 2,\ 1 \to 1$

Es gilt also etwa [Gl. (3.6–1)]

$$\mathscr{P}_{(132)}\, \mathscr{L}^{123}\, \mathscr{P}^{\dagger}_{(132)} = \mathscr{L}^{312} \text{ [2]} \tag{33}$$

und entsprechend Gl. (29)

$$\mathscr{P}_{(132)}\, |v_k^1 v_l^2 v_m^3\rangle = |v_k^3 v_l^1 v_m^2\rangle = |v_l^1 v_m^2 v_k^3\rangle .$$

Damit ist auch die Wirkung eines Permutationsoperators $\mathscr{P}_\varrho$ auf einen beliebigen Vektor $|\Phi\rangle$ erklärt: Der Vektor $|\mathscr{P}_\varrho \Phi\rangle$ hat die Komponenten

$$\langle v_k^1 v_l^2 \cdots | \mathscr{P}_\varrho \Phi\rangle = \langle \mathscr{P}_\varrho^{-1}\, v_k^1 v_l^2 \cdots | \Phi\rangle . \tag{34}$$

Hat z. B. $|\Phi\rangle$ die Komponenten

$$\langle v_k^1 v_l^2 v_m^3 | \Phi\rangle = \Phi(k, l, m) ,$$

so besitzt der Vektor $|\mathscr{P}_{(132)} \Phi\rangle$ die Komponenten

$$\langle v_k^1 v_l^2 v_m^3 | \mathscr{P}_{(132)}\, \Phi\rangle = \langle \mathscr{P}_{(123)}\, v_k^1 v_l^2 v_m^3 | \Phi\rangle = \langle v_m^1 v_k^2 v_l^3 | \Phi\rangle = \Phi(m, k, l) .$$

Eine Observable $\mathscr{L}^{12\ldots N}$ ist *symmetrisch in allen N Systemen*, wenn sie invariant ist gegen alle Permutationen, d. h., wenn sie mit allen $N!$ Permutationsopera-

---

[1]) Das heißt, 1 wird durch 2 ersetzt, 2 durch 3, 3 durch 1.

[2]) Die Permutationsoperatoren erfüllen die im Anhang 5.4 § 2 angegebene Gruppentafel der Permutationen von drei Elementen: Zum Beispiel gehört $\mathscr{P}^{\dagger}_{(132)} = \mathscr{P}^{-1}_{(132)}$ zu der Permutation, die die Permutation (132) wieder rückgängig macht. Dies ist die Permutation (123). Also ist $\mathscr{P}^{\dagger}_{(132)} = \mathscr{P}_{(123)}$.

toren $\mathscr{P}_\varrho$ vertauscht

$$\boxed{[\mathscr{L}, \mathscr{P}_\varrho] = \mathcal{O}} \qquad (\varrho = 1, \ldots, N!). \tag{35}$$

Mit $|u_\Lambda\rangle$ sind dann auch alle Vektoren $|\mathscr{P}_\varrho\, u_\Lambda\rangle$ Eigenvektoren von $\mathscr{L}$ zum Eigenwert Λ.

Aufg. 108: Man behandle die Aufspaltung der Austauschentartung dreier Teilsysteme gruppentheoretisch. Was ergibt sich für N Teilsysteme?

§ 3. Symmetrisierungs- und Antimetrisierungsoperator

Wir definieren einen Symmetrisierungsoperator $\mathscr{S}$ und einen Antimetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ durch die Gleichungen

$$\boxed{\mathscr{S} = \frac{1}{N!}\sum_{\varrho=1}^{N!} \mathscr{P}_\varrho, \quad \mathscr{A} = \frac{1}{N!}\sum_{\varrho=1}^{N!} (-1)^P \mathscr{P}_\varrho} ; \tag{36}$$

dabei ist $(-1)^P = \pm 1$, je nachdem ob $\mathscr{P}_\varrho$ eine gerade oder ungerade Permutation beschreibt.

Beispiele:

$$N = 2: \quad \mathscr{S} = \frac{1}{2}(1 + \mathscr{P}_{(12)}), \quad \mathscr{A} = \frac{1}{2}(1 - \mathscr{P}_{(12)}), \tag{37}$$

$$N = 3: \quad \left.\begin{aligned} \mathscr{S} &= \frac{1}{6}(1 + \mathscr{P}_{(123)} + \mathscr{P}_{(132)} + \mathscr{P}_{(12)(3)} + \mathscr{P}_{(13)(2)} + \mathscr{P}_{(23)(1)}), \\ \mathscr{A} &= \frac{1}{6}(1 + \mathscr{P}_{(123)} + \mathscr{P}_{(132)} - \mathscr{P}_{(12)(3)} - \mathscr{P}_{(13)(2)} - \mathscr{P}_{(23)(1)}). \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

Multipliziert man $\mathscr{S}$ oder $\mathscr{A}$ mit irgendeinem Permutationsoperator $\mathscr{P}_\varrho$, so läßt sich in den Summen

$$\mathscr{P}_\varrho \mathscr{S} = \frac{1}{N!}\sum_{\varrho'} \mathscr{P}_\varrho \mathscr{P}_{\varrho'}, \quad \mathscr{P}_\varrho \mathscr{A} = \frac{1}{N!}\sum_{\varrho'} (-1)^{P'} \mathscr{P}_\varrho \mathscr{P}_{\varrho'}$$

jedes Produkt von Permutationen durch eine resultierende Permutation ersetzen, wobei dann die Summen wieder über alle $N!$ Permutationen laufen. Man erhält damit

$$\boxed{\mathscr{P}_\varrho \mathscr{S} = \mathscr{S}\mathscr{P}_\varrho = \mathscr{S}, \quad \mathscr{P}_\varrho \mathscr{A} = \mathscr{A}\mathscr{P}_\varrho = (-1)^P \mathscr{A}}\,.^{1)} \tag{39}$$

Die Operatoren $\mathscr{S}$ und $\mathscr{A}$ sind *Projektionsoperatoren.* Sie sind nämlich HERMITEsch

$$\mathscr{S}^\dagger = \mathscr{S}, \quad \mathscr{A}^\dagger = \mathscr{A} \tag{40}$$

[weil in den Summen (36) der Übergang von $\mathscr{P}_\varrho$ nach $\mathscr{P}_\varrho^\dagger = \mathscr{P}_\varrho^{-1}$ lediglich den Übergang zur inversen Permutation bedeutet, bei dem gerade Permutatio-

[1]) Ist $\mathscr{P}_\varrho$ eine gerade Permutation, so ist $\mathscr{P}_\varrho \mathscr{A} = \mathscr{A}$, weil das Produkt zweier gerader Permutationen gerade, das Produkt einer geraden und ungeraden Permutation ungerade ist. Für ungerade $\mathscr{P}_\varrho$ hingegen wird $\mathscr{P}_\varrho \mathscr{A} = -\mathscr{A}$.

nen gerade und ungerade Permutationen ungerade bleiben] und besitzen die Einzeloperator-Eigenschaft

$$\mathscr{S}^2 = \mathscr{S}, \quad \mathscr{A}^2 = \mathscr{A}. \tag{41}$$

Nach Gl. (36) und (39) erhält man nämlich z. B.

$$\mathscr{A}^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} (-1)^P \mathscr{A} \mathscr{P}_{\varrho} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho=1}^{N!} \mathscr{A} = \mathscr{A}.$$

Für das Produkt $\mathscr{S}\,\mathscr{A}$ liefert Gl. (39)

$$\mathscr{S}\,\mathscr{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} \mathscr{P}_{\varrho} \mathscr{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\varrho} (-1)^P \mathscr{A} = \mathscr{O},$$

weil es ebensoviele gerade wie ungerade Permutationen gibt,

$$\boxed{\mathscr{S}\,\mathscr{A} = \mathscr{A}\,\mathscr{S} = \mathscr{O}}\,. \tag{42}$$

Für $N = 2$ ist nach Gl. (37) die Summe $\mathscr{S} + \mathscr{A} = \mathscr{1}$, für $N > 2$ hingegen ist dies nicht mehr der Fall [vgl. Gl. (38)]. Bezeichnen wir den restlichen Projektionsoperator mit $\mathscr{Q}$,

$$\mathscr{S} + \mathscr{A} + \mathscr{Q} = \mathscr{1}, \tag{43}$$

so folgt aus Gl. (41) und (42)

$$\left.\begin{aligned} &\mathscr{S}\,\mathscr{Q} = \mathscr{S}(\mathscr{1} - \mathscr{S} - \mathscr{A}) = \mathscr{S} - \mathscr{S}^2 = \mathscr{O} \\ &\text{und analog} \\ &\mathscr{A}\,\mathscr{Q} = \mathscr{O}, \quad \mathscr{Q}^2 = \mathscr{Q}. \end{aligned}\right\} \tag{44}$$

Die Gl. (42) bis (44) bedeuten, daß die Projektionsoperatoren $\mathscr{S}$, $\mathscr{A}$ und $\mathscr{Q}$ auf drei *orthogonale Teilräume* $\mathfrak{U}_N^+$, $\mathfrak{U}_N^-$, $\mathfrak{U}_N^Q$ projizieren, die zusammen den gesamten unitären Raum $\mathfrak{U}_N$ bilden: Die Vektoren $|\varphi^+\rangle$, $|\varphi^-\rangle$, $|\varphi^Q\rangle$ dieser Teilräume ergeben sich aus einem beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ von $\mathfrak{U}_N$ durch Anwendung dieser Projektionsoperatoren,

$$\boxed{|\varphi^+\rangle = \mathscr{S}\,|\varphi\rangle, \quad |\varphi^-\rangle = \mathscr{A}\,|\varphi\rangle, \quad |\varphi^Q\rangle = \mathscr{Q}\,|\varphi\rangle}\,. \tag{45}$$

Diese Vektoren sind aufeinander orthogonal

$$\langle\varphi^+ \,|\, \varphi^-\rangle = 0^{1)}, \quad \langle\varphi^+ \,|\, \varphi^Q\rangle = 0, \quad \langle\varphi^- \,|\, \varphi^Q\rangle = 0. \tag{46}$$

Aus Gl. (39) erhalten wir

$$\boxed{\begin{aligned} \mathscr{P}_{\varrho}\,|\varphi^+\rangle &= |\varphi^+\rangle \\ \mathscr{P}_{\varrho}\,|\varphi^-\rangle &= (-1)^P\,|\varphi^-\rangle \end{aligned}}\,. \tag{47}$$

[1]) Nach Gl. (40) und (42) ist nämlich $\langle\varphi^+ \,|\, \varphi^-\rangle = \langle\mathscr{S}\varphi \,|\, \mathscr{A}\varphi\rangle = \langle\varphi \,|\, \mathscr{S}\,\mathscr{A}\,\varphi\rangle = 0$.

Alle Vektoren $|\varphi^+\rangle$ aus $\mathfrak{U}_N^+$ transformieren sich damit nach der *identischen Darstellung* ${}^1\Gamma_1$ der Permutationsgruppe S_N und alle Vektoren $|\varphi^-\rangle$ aus $\mathfrak{U}_N^-$ nach der *alternierenden Darstellung* ${}^1\Gamma_2$, bei der alle geraden Permutationen durch $+1$ und alle ungeraden Permutationen durch -1 dargestellt werden. (Vgl. dazu das in Kap. 5.4 ausführlich besprochene Beispiel der Permutationsgruppe S_3.) Wie man in der Theorie der Permutationsgruppen zeigt (vgl. z. B. M. HAMERMESH, Group Theory, London 1962), sind ${}^1\Gamma_1$ und ${}^1\Gamma_2$ die einzigen eindimensionalen Darstellungen von S_N. Daher müssen sich alle Vektoren $|\varphi^Q\rangle$ aus $\mathfrak{U}_N^Q$ nach Darstellungen ${}^t\Gamma$ $(t > 1)$ von S_N transformieren, die *nur mehrdimensionale, irreduzible Darstellungen*, aber nicht ${}^1\Gamma_1$ und ${}^1\Gamma_2$ enthalten,

$$\boxed{\mathcal{P}_\varrho\,|\varphi^{Q,\mu}\rangle = \sum_{\mu'=1}^{t} |\varphi^{Q,\mu'}\rangle\, P_\varrho^{\mu'\mu}}\,. \tag{48}$$

Die Koeffizienten

$$P_\varrho^{\mu'\mu} = \langle \varphi^{Q,\mu} \mid \mathcal{P}_\varrho\, \varphi^{Q,\mu'}\rangle$$

sind t-dimensionale Darstellungsmatrizen von S_N (5.4 § 3).

Fünftes Kapitel

Identische Teilchen

§ 1. Die Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen
Bosonen und Fermionen

Für ein System, das aus mehreren, gleichen Elementarteilchen, z. B. Elektronen, besteht, ergibt die quantentheoretische Beschreibung der Identität der Teilchen ein Verhalten, das in der klassischen Mechanik unbekannt ist. Behandelt man nämlich dort etwa die Dynamik von makroskopischen, identischen Kugeln, so ist es sinnvoll die Kugeln zu numerieren. Zum Beispiel wird durch ein verschiedenes Anstreichen die Individualität der einzelnen Kugeln gewährleistet, ohne daß dadurch eine merkliche Beeinflussung der Dynamik der Kugeln eintritt. Diese Individualität der einzelnen Kugeln läßt sich während des ganzen Bewegungsvorgangs verfolgen, sie bleiben unterscheidbar.

Im Mikroskopischen hingegen ist es nicht möglich, „Marken“ anzubringen, ohne die Teilchen wesentlich zu zerstören. *Gleiche Elementarteilchen* (mit gleicher Masse, Ladung, Spin usw.) ***besitzen keine Individualität, sie sind in Strenge ununterscheidbar.***[1]) Eine irgendwie gewählte Anfangsnumerierung ist willkürlich

---

[1]) Dieses Verhalten ist nicht sehr verwunderlich, wenn man berücksichtigt, daß die Teilcheneigenschaft im Rahmen des Dualismus Welle—Korpuskel sowieso nur eine mögliche Form ist, in der sich uns der Mikrokosmos manifestiert. Bezüglich der Welleneigenschaften der Materie ist ja die Teilchenvorstellung sinnlos.

und wegen des statistischen Verhaltens nicht weiter verfolgbar. Die Ununterscheidbarkeit der Teilchen bedeutet also, *daß es keine Observable gibt, welche die Individualität der Teilchen festlegt. Das heißt aber, für ein System von N gleichen Teilchen müssen alle Operatoren $\mathscr{L}$ mit den Permutationsoperatoren $\mathscr{P}_\varrho$ vertauschbar sein,*

$$\boxed{[\mathscr{L}, \mathscr{P}_\varrho] = \mathscr{O} \text{ für alle } \mathscr{L} \text{ und } \varrho = 1, \ldots, N!}\,. \tag{1}$$

Dies ist eine wesentlich schärfere Einschränkung, als wir sie im 4.4 § 1 vorliegen hatten: Dort war lediglich gefordert, daß der HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ mit allen $\mathscr{P}_\varrho$ vertauschbar sein sollte.

Da der unitäre Raum, in dem ein physikalisches System quantentheoretisch beschrieben wird, ganz allgemein durch die Vertauschungsrelationen der Observablen bestimmt wird, muß die Ununterscheidbarkeitsbedingung (1) die Struktur des unitären Raumes eines N-Teilchenproblemes beeinflussen. Um diese aufzufinden, gehen wir von dem vollständigen unitären Raum *eines* Teilchens aus, in dem auch den inneren Freiheitsgraden des Teilchens Rechnung getragen ist. Für ein Elektron ist also der die Bahn- *und* Spingrößen umfassende unitäre Raum $\mathfrak{U}_{\text{el}} = \mathfrak{U}_B \times \mathfrak{u}_s$ zugrunde zu legen (4.3 § 4). Aus den Ein-Teilchen-Räumen konstruieren wir den direkten Produktraum $\mathfrak{U}_N = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \times \cdots \mathfrak{U}^N$. Dieser Raum ist angemessen, wenn es sich um N verschiedene Teilchen handelt. Für ununterscheidbare Teilchen hingegen ist der Raum $\mathfrak{U}_N$ zu groß; er umfaßt mehr Zustände, als nach Gl. (1) zugelassen werden: *Die erlaubten Zustände können nur symmetrisch oder antimetrisch in den Teilchen sein.*

Beweis: Nach Gl. (4.4–43) zerfällt der Produktraum $\mathfrak{U}_N$ in drei orthogonale Teilräume $\mathfrak{U}_N^+$, $\mathfrak{U}_N^-$, $\mathfrak{U}_N^Q$. Die Vektoren $|\varphi^Q\rangle$ des letzteren transformieren sich bei Anwendung eines Permutationsoperators $\mathscr{P}_\varrho$ entsprechend Gl. (4.4–48). Für die Observable, die durch den Projektionsoperator

$$\mathscr{F} = |\varphi^{Q,\mu}\rangle\langle\varphi^{Q,\mu}|$$

auf einen Zustand $|\varphi^{Q,\mu}\rangle$ beschrieben wird, gilt dann

$$\begin{aligned}\mathscr{P}_\varrho \mathscr{F} \mathscr{P}_\varrho^\dagger = |\mathscr{P}_\varrho \varphi^{Q,\mu}\rangle\langle\mathscr{P}_\varrho \varphi^{Q,\mu}| &= \sum_{\mu',\mu''} |\varphi^{Q,\mu'}\rangle\langle\varphi^{Q,\mu''}|\, P_\varrho^{\mu'\mu}\, P_\varrho^{\mu''\mu*} \\ &\neq |\varphi^{Q,\mu}\rangle\langle\varphi^{Q,\mu}| = \mathscr{F}\,.\end{aligned} \tag{2}$$

Sie widerspricht also der Ununterscheidbarkeitsbedingung (1). Man könnte sie als „Marke“ verwenden, um die Teilchen zu unterscheiden. *Die Ununterscheidbarkeit verbietet damit alle Zustände* $|\varphi^Q\rangle$. Die einzig möglichen Zustände, die mit (1) verträglich sind, sind die symmetrischen und antimetrischen.

Die Symmetrie sämtlicher Observabler $\mathscr{L}$ gegenüber Permutationen ergibt ferner, *daß es keine Observable gibt, die von* $\mathfrak{U}_N^-$ *nach* $\mathfrak{U}_N^+$ *oder umgekehrt führt:*

Ist z. B. $|\varphi^-\rangle$ ein Vektor aus $\mathfrak{U}_N^-$, so ist $|\mathscr{L}\,\varphi^-\rangle$ ebenfalls ein Vektor aus $\mathfrak{U}_N^-$. Aus Gl. (1) folgt nämlich $\mathscr{A}\,\mathscr{L} = \mathscr{L}\,\mathscr{A}$, und es ist daher

$$\mathscr{L}\,|\varphi^-\rangle = \mathscr{L}\,\mathscr{A}\,|\varphi\rangle = \mathscr{A}\,\mathscr{L}\,|\varphi\rangle \tag{3}$$

wieder ein Vektor aus $\mathfrak{U}_N^-$. Weil die Vektoren von $\mathfrak{U}_N^+$ orthogonal auf jenen von $\mathfrak{U}_N^-$ sind, Gl. (4.4–46), verschwinden also alle Matrixelemente

$$\boxed{\langle\varphi^+\,|\,\mathscr{L}\,\varphi^-\rangle = 0}\,. \tag{4}$$

Befindet sich der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ eines Systems identischer Teilchen zur Zeit $t = t_0$ in $\mathfrak{U}_N^+$ bzw. $\mathfrak{U}_N^-$, *so bleibt er zu allen späteren Zeiten in demselben Raum.* Ist nämlich $\mathscr{H}$ mit allen Permutationsoperatoren vertauschbar, so gilt dies auch für den unitären Operator $\mathscr{U}(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}\cdot(t-t_0)}$, der (im SCHRÖDINGER-Bild) die dynamische Entwicklung des Zustandsvektors $|\Phi\rangle$ angibt,

$$[\mathscr{U}, \mathscr{P}_\varrho] = \mathscr{O}\,. \tag{5}$$

Es gilt also

$$|\Phi^+(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}\cdot(t-t_0)}\,|\Phi^+(t_0)\rangle, \quad |\Phi^-(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}\cdot(t-t_0)}\,|\Phi^-(t_0)\rangle\,. \tag{6}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen dem symmetrischen und dem antimetrischen Raum ist stets Null. Die Beschreibung eines bestimmten Systems identischer Teilchen kann also auf Grund der Symmetrie aller Observabler gegenüber Teilchenvertauschung nur entweder im symmetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^+$ oder im antimetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^-$ erfolgen.

Die Teilchen, die im symmetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^+$ dargestellt werden, nennt man BOSE-Teilchen oder *Bosonen*, jene, die im antimetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^-$ beschrieben werden, FERMI-Teilchen oder *Fermionen*. Die Erfahrung zeigt, daß

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{Bosonen} = \text{Teilchen mit ganzzahligem Spin } (s = 0, 1, \ldots) \\ &\text{Fermionen} = \text{Teilchen mit halbzahligem Spin } \left(s = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \ldots\right) \end{aligned}} \tag{7}$$

sind. Diesen fundamentalen Zusammenhang zwischen der Symmetrie der Zustände gegenüber Teilchenpermutationen und dem inneren Drehimpuls konnte PAULI 1940 quantenfeldtheoretisch aus der relativistischen Invarianz der Materiefeldgleichungen beweisen.

Da die besonders wichtigen Elementarteilchen, Protonen, Neutronen und Elektronen zu den Fermionen zählen, wollen wir uns in den folgenden Überlegungen auf die Betrachtung von Fermionen beschränken. Auf Bosonen kommen wir in Kap. 4.6 noch zu sprechen.

§ 2. Der antimetrische Raum $\mathfrak{U}_N^-$

Für das Rechnen im antimetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^-$ der Fermionen sind *Basisvektoren* notwendig. Wir wollen sie aus den Produkten der Einteilchenzustände

$$|v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \dots v_{k_N}^N\rangle = |v_{k_1}^1\rangle\, |v_{k_2}^2\rangle \dots\, |v_{k_N}^N\rangle \tag{8}$$

konstruieren, die im unitären Raum $\mathfrak{U}_N$ orthonormiert und vollständig sein sollen[1])

$$\langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N \mid v_{k_1'}^1 \dots v_{k_N'}^N\rangle = \delta(k_1, k_1') \dots \delta(k_N, k_N'),$$

$$\mathop{\mathrlap{\sum}\int}_{k_1 \dots k_N} |v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N\rangle \langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N|\, \mathrm{d}k_1 \dots \mathrm{d}k_N = \mathbb{1} \quad \text{in } \mathfrak{U}_N. \tag{9}$$

Wenden wir auf die Produktvektoren (8) den Antimetrisierungsoperator $\mathscr{A}$ an, so erhalten wir antimetrische Zustände, die wegen der Eigenschaft (4.4-36) als Determinante (SLATER) geschrieben werden können,

$$\mathscr{A}\, |v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \dots v_{k_N}^N\rangle = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |v_{k_1}^1\rangle & |v_{k_1}^2\rangle \dots |v_{k_1}^N\rangle \\ |v_{k_2}^1\rangle & |v_{k_2}^2\rangle \dots |v_{k_2}^N\rangle \\ \vdots & \\ |v_{k_N}^1\rangle & |v_{k_N}^2\rangle \dots |v_{k_N}^N\rangle \end{vmatrix}.$$

Diese Vektoren sind noch nicht normiert. Zur Normierung ist es nötig, den Faktor $\sqrt{N!}$ anzufügen,

$$\boxed{|v_{k_1 k_2 \dots k_N}^-\rangle \equiv \sqrt{N!}\, \mathscr{A}\, |v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \dots v_{k_N}^N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |v_{k_1}^1\rangle & |v_{k_1}^2\rangle \dots |v_{k_1}^N\rangle \\ |v_{k_2}^1\rangle & |v_{k_2}^2\rangle \dots |v_{k_2}^N\rangle \\ \vdots & \\ |v_{k_N}^1\rangle & |v_{k_N}^2\rangle \dots |v_{k_N}^N\rangle \end{vmatrix}.^{2)}} \tag{10}$$

Es ergibt sich dann nämlich für das Skalarprodukt, wenn man berücksichtigt, daß $\mathscr{A}$ Projektionsoperator ist,

$$\begin{aligned} \langle v_{k_1 \dots k_N}^- \mid v_{k_1' \dots k_N'}^-\rangle &= N!\, \langle \mathscr{A}\, v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N \mid \mathscr{A}\, v_{k_1'}^1 \dots v_{k_N'}^N\rangle \\ &= N!\, \langle v_{k_1}^1 \dots v_{k_N}^N \mid \mathscr{A}\, v_{k_1'}^1 \dots v_{k_N'}^N\rangle \\ &= \begin{vmatrix} \langle v_{k_1} \mid v_{k_1'}\rangle \dots \langle v_{k_1} \mid v_{k_N'}\rangle \\ \vdots \\ \langle v_{k_N} \mid v_{k_1'}\rangle \dots \langle v_{k_N} \mid v_{k_N'}\rangle \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

d. h.,

$$\boxed{\langle v_{k_1 \dots k_N}^- \mid v_{k_1' \dots k_N'}^-\rangle = \begin{vmatrix} \delta(k_1, k_1') \dots \delta(k_1, k_N') \\ \vdots \\ \delta(k_N, k_1') \dots \delta(k_N, k_N') \end{vmatrix}}, \tag{11}$$

[1]) Ein Index k umfaßt also Bahn- *und* Spinquantenzahlen eines Teilchens, z. B. (n, l, m_l, m_s) oder (n, l, j, m_j).

[2]) Man beachte die Nomenklatur: $|v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \dots v_{k_N}^N\rangle$ ist ein Produktvektor, $|v_{k_1 k_2 \dots k_N}^-\rangle$ ein antimetrischer Vektor!

so daß die HILBERT-Raum-Vektoren $|v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle$ auf eins normiert sind

$$\langle v^-_{k_1\ldots k_N} \,|\, v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle = 1 \tag{12}$$

(man beachte, daß $k_1 \neq k_2 \neq \cdots \neq k_N$ ist).

Die Vektoren $|v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle$ kann man als *Basissystem in dem antimetrischen Raum* $\mathfrak{U}^-_N$ verwenden, d. h., ein beliebiger Vektor $|\varphi^-\rangle$ ist nach ihnen entwickelbar. Es folgt nämlich aus der Entwicklung eines beliebigen Vektors $|\varphi\rangle$ im Raum $\mathfrak{U}_N$

$$|\varphi\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle\langle v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}|\varphi\rangle\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N$$

für einen Vektor $|\varphi^-\rangle = |\mathscr{A}\varphi\rangle$ im antimetrischen Raum die Darstellung

$$\begin{aligned}|\mathscr{A}\varphi\rangle &= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle\langle v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}|\mathscr{A}\varphi\rangle\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N \\ &= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle\langle \mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}|\mathscr{A}\varphi\rangle\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N,\end{aligned} \tag{13}$$

wobei die Projektionsoperatoreigenschaft $\mathscr{A} = \mathscr{A}^2$ benutzt wurde. Multiplizieren wir diese Gleichung nochmals mit $\mathscr{A}$, so erhalten wir

$$|\mathscr{A}\varphi\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |\mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle\langle \mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}|\mathscr{A}\varphi\rangle\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N. \tag{14}$$

Dieses Ergebnis besagt, daß wir einen beliebigen Vektor $|\varphi^-\rangle$ des antimetrischen Raumes nach den $|\mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle$ entwickeln können:

$$\boxed{\begin{aligned}&\mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |\mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}\rangle\langle \mathscr{A} v^1_{k_1}\ldots v^N_{k_N}|\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N \\ &\quad = \frac{1}{N!}\mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1\ldots k_N} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle\langle v^-_{k_1\ldots k_N}|\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N \\ &= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1<\ldots<k_N} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle\langle v^-_{k_1\ldots k_N}|\,\mathrm{d}k_1\ldots\mathrm{d}k_N = \mathbb{1} \text{ in } \mathfrak{U}^-_N\end{aligned}} \tag{15}$$

Während in den ersten beiden Zeilen die Summierung über alle $k_1\ldots k_N$ läuft, wird in der dritten Zeile nur über $k_1 < k_2 < \ldots k_N$ summiert.

Durch analoge Überlegungen lassen sich mittels des Symmetrisierungsoperators $\mathscr{S}$ Basisvektoren $|u^+_{k_1\ldots k_N}\rangle$ im symmetrischen Raum $\mathfrak{U}^+_N$ bestimmen.

Aufg. 109: Man untersuche die unitären Basistransformationen im $\mathfrak{U}^-_N$.
Aufg. 110: Zwischen zwei Fermionen herrsche eine kugelsymmetrische Wechselwirkung. Man untersuche den Aufbau der Energieeigenvektoren $|u^M_{\alpha J}\rangle$ durch
a) j—j-Kopplung,
b) L—S-Kopplung (RUSSEL-SAUNDERS).

§ 3. Das Paulische Ausschließungsprinzip

Ein beliebiger Zustand eines Systems von N identischen Fermionen (z. B. Elektronen) wird durch einen Vektor $|\Phi^-\rangle$ im antimetrischen Raum $\mathfrak{U}_N^-$ beschrieben. Er läßt sich nach den Basisvektoren $|v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle$ von $\mathfrak{U}_N^-$ entwickeln[1])

$$|\Phi^-\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1<\ldots<k_N} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle \langle v^-_{k_1\ldots k_N}|\Phi^-\rangle \, dk_1 \ldots dk_N. \tag{16}$$

Befinden sich die Fermionen, die z. B. unter dem Einfluß eines gemeinsamen Potentialfeldes stehen mögen, insbesondere in *Ein*teilchenzuständen $k_1, \ldots k_N$, so ist ihr Zustandsvektor

$$|\Phi^-\rangle = |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle \tag{17}$$

eine SLATER-Determinante (10) in den Einteilchenvektoren. Die Determinante verschwindet, wenn wenigstens irgend zwei Einteilchenzustände gleich sind. *Es ist unmöglich, daß sich zwei identische Fermionen in gleichen Einteilchenzuständen befinden* (PAULI*sches Ausschließungsprinzip*").[2]) Es kann also z. B. nicht eintreten, daß zwei Elektronen sich am selben Ort befinden und dieselbe Komponente des Spins in einer bestimmten Richtung besitzen, oder daß zwei Elektronen in einem Atom in Zuständen mit denselben Quantenzahlen n, l, m_l, m_s auftreten.

Die geschichtliche Entwicklung erfolgte gerade in umgekehrter Reihenfolge wie wir sie hier dargestellt haben. PAULI formulierte 1925 das Ausschließungsprinzip, um zu einer Deutung der experimentell gegebenen Struktur der Atomspektren zu gelangen. Durch DIRAC und HEISENBERG wurde 1926 erkannt, daß die Antimetrie das allgemein zugrunde liegende Prinzip ist, das auch gültig bleibt, wenn zwischen den Fermionen eine Wechselwirkung herrscht.

Aufg. 111: Zwei Elektronen haben den Impuls $\mathfrak{p}_1$, $\mathfrak{p}_2$ (in einem infinitesimalen Bereich $\Delta^3 p$) und die Spinkomponenten $\hbar m_1$, $\hbar m_2$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, eines der Elektronen im Volumenelement $\Delta^3 x$ am Ort $\mathfrak{r}_1$ mit der Spinkomponente $\hbar m_1$, das andere im Volumenelement $\Delta^3 x$ am Ort $\mathfrak{r}_2$ mit der Spinkomponente $\hbar m_2$ anzutreffen?

§ 4. Der unitäre Raum $\mathfrak{U}^-$ variabler Fermionenzahl

Nimmt man die Punktmechanik als Ausgang für die quantentheoretische Beschreibung, so ist von vornherein die Anzahl N der Teilchen vorgegeben, der unitäre Raum gehört zu einer bestimmten Teilchenzahl, z. B. $\mathfrak{U}_N^-$ zu N Fermi-

---

[1]) Für manche Zwecke ist jedoch auch die Entwicklung von $|\Phi^-\rangle$ nach den Produktvektoren $|v^1_{k_1} v^2_{k_2} \ldots v^N_{k_N}\rangle$ des Raumes $\mathfrak{U}_N$ zweckmäßig, z. B. als Ortsdarstellung $\langle u_{\mathfrak{r}_1\mathfrak{r}_2\ldots\mathfrak{r}_N}|\,\Phi^-\rangle = \Phi^-(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2, \ldots, \mathfrak{r}_N)$. Diese Produktvektoren können aber keine Eigenzustände des Fermionensystems sein.

[2]) Da für Bosonen dieses Argument nicht zutrifft, können sich beliebig viele Bosonen im selben Einteilchenzustand befinden.

onen. Von dieser Einschränkung kann man sich dadurch befreien, daß man aus den unitären Räumen $\mathfrak{U}_N^-$, die zu verschiedenen N gehören, einen größeren unitären Raum $\mathfrak{U}^-$ konstruiert. Man gelangt auf diese Weise zu einer Formulierung der Mehrteilchenquantentheorie, die — wie wir sehen werden — mit der Quantentheorie des Feldbildes übereinstimmt. Die physikalischen Prozesse werden in dieser sehr häufig benutzten Formulierung durch Teilchenvernichtungen und -erzeugungen beschrieben.

Wir beginnen mit einem Raum $\mathfrak{U}_0$, bestehend aus *einem* Einheitsvektor $|0\rangle$, in dem das *Vakuum*, also *kein* Teilchen, beschrieben wird. Diesen Vektor fügen wir orthogonal zu dem unitären Raum $\mathfrak{U}_1$, in dem alle Zustände *eines* Teilchens liegen, hinzu. Ein Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ in diesem größeren Raum hat dann die Komponentenzerlegung

$$|\Phi\rangle = |0\rangle\langle 0|\Phi\rangle + \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_k |v_k\rangle\langle v_k|\Phi\rangle\,\mathrm{d}k. \tag{18}$$

$|\langle 0|\Phi\rangle|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit, daß kein Teilchen vorhanden ist, $|\langle v_k|\Phi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen im Zustand $|v_k\rangle$ vorliegt.

Für das orthogonale Hinzufügen der Zustände mehrerer Teilchen ist zu unterscheiden, ob es sich um Bosonen oder Fermionen handelt. Wir wollen hier die Überlegungen mit *Fermionen* durchführen.

Die antimetrisierten Zweiteilchenzustände $|v_{k_1k_2}^-\rangle$ aus $\mathfrak{U}_2^-$ werden also im nächsten Schritt orthogonal angefügt, usw. $|v_{k_1k_2\ldots k_N}^-\rangle$ aus $\mathfrak{U}_N^-$, usw. Für den auf diese Weise gewonnenen unitären Raum $\mathfrak{U}^-$, der somit Zustände mit verschiedenen Teilchenzahlen umfaßt, schreiben wir formal (zum Unterschied vom direkten Produktraum)

$$\mathfrak{U}^- = \mathfrak{U}_0 + \mathfrak{U}_1 + \mathfrak{U}_2^- + \cdots + \mathfrak{U}_N^- + \cdots. \tag{19}$$

Ein beliebiger Vektor $|\Phi^-\rangle$ aus $\mathfrak{U}^-$ hat also die Zerlegung

$$\boxed{\begin{aligned}|\Phi^-\rangle &= |0\rangle\langle 0|\Phi^-\rangle + \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_k |v_k\rangle\langle v_k|\Phi^-\rangle\,\mathrm{d}k + \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_{k_1<k_2} |v_{k_1k_2}^-\rangle\langle v_{k_1k_2}^-|\Phi^-\rangle\,\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_2 \\ &\quad + \cdots + \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_{k_1<k_2<\ldots k_N} |v_{k_1k_2\ldots k_N}^-\rangle\langle v_{k_1k_2\ldots k_N}^-|\Phi^-\rangle\,\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_2\ldots\mathrm{d}k_N + \cdots\end{aligned}}. \tag{20}$$

Zum Beispiel ist $|\langle v_{k_1k_2}^-|\Phi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß zwei Teilchen vorliegen, und zwar im antimetrischen Zustand $|v_{k_1k_2}^-\rangle$.

Die orthogonale Konstruktion von $\mathfrak{U}^-$ bedeutet, daß alle Skalarprodukte von Vektoren aus Räumen $\mathfrak{U}_N^-$ und $\mathfrak{U}_{N'}^-$ zu verschiedenen Teilchenzahlen N und N' verschwinden,

$$\boxed{\langle v_{k_1'\ldots k_{N'}'}^-|v_{k_1\ldots k_N}^-\rangle = 0 \text{ für } N' \neq N}, \tag{21}$$

also z. B.

$$\left.\begin{array}{r} \langle 0 \mid v_k \rangle = 0, \quad \langle 0 \mid v^{--}_{k_1 k_2} \rangle = 0, \quad \langle 0 \mid v^{-}_{k_1 k_2 k_3} \rangle = 0, \ldots \\ \langle v_{k'} \mid v^{--}_{k_1 k_2} \rangle = 0, \quad \langle v_{k'} \mid v^{-}_{k_1 k_2 k_3} \rangle = 0, \ldots \\ \langle v^{--}_{k_1' k_2'} \mid v^{-}_{k_1 k_2 k_3} \rangle = 0, \ldots \\ \vdots \end{array}\right\} \quad (21a)$$

Im Unterraum $\mathfrak{U}_N^-$ (mit festem N) sind die Basisvektoren $|v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle$ nach Gl. (11) orthonormiert.

§ 5. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Fermionen

a) Definition

Es mögen Operatoren $a_k^\dagger$ eingeführt werden, die vom unitären Raum $\mathfrak{U}_N^-$ in den Raum $\mathfrak{U}_{N+1}^-$ führen:

$$\left.\begin{array}{l} |v_k\rangle = a_k^\dagger \, |0\rangle , \\ |v^{--}_{k k_1}\rangle = a_k^\dagger \, |v_{k_1}\rangle = a_k^\dagger \, a_{k_1}^\dagger \, |0\rangle , \\ \vdots \\ \boxed{|v^-_{k k_1 \ldots k_N}\rangle = a_k^\dagger \, |v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle} \, . \end{array}\right\} \quad (22)$$

Der Operator $a_k^\dagger$ erzeugt also aus dem Vakuum $|0\rangle$ einen Einteilchenzustand $|v_k\rangle$ in $\mathfrak{U}_1$ (Fig. 84). Wendet man $a_k^\dagger$ auf einen Einteilchenzustand $|v_{k_1}\rangle$ an, so ergibt sich der antimetrische (!) Zweiteilchenzustand $|v^-_{k k_1}\rangle$. Diesen Zustand kann man auch durch Anwendung von $a_k^\dagger \, a_{k_1}^\dagger$ auf das Vakuum erreichen. Entsprechend lassen sich die antimetrischen N-Teilchenzustände konstruieren. Auf Grund dieser Eigenschaft nennt man die $a_k^\dagger$ *Erzeugungsoperatoren.*

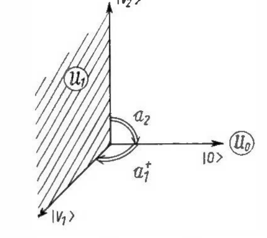


Fig. 84. Reelles Abbild der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren [Gl. (22_1) und (28_2)]

Weil bei der Vertauschung zweier Indizes der antimetrische Zustand sein Vorzeichen wechselt, gilt

$$a_k^\dagger \, a_{k'}^\dagger = - \, a_{k'}^\dagger \, a_k^\dagger . \quad (23)$$

Insbesondere verschwindet also das Quadrat — und damit auch alle höheren Potenzen — von $a_k^\dagger$,

$$a_k^\dagger \, a_k^\dagger = \mathcal{O} , \quad (24)$$

ein Ausdruck des Pauli-Prinzips, wonach zwei Teilchen sich nicht im gleichen Einteilchenzustand k befinden können.

Nun sollen die Eigenschaften des zu $a_k^\dagger$ adjungierten Operators $a_k = (a_k^\dagger)^\dagger$ untersucht werden. Dazu beachten wir, daß nach Gl. (20) der Einheitsoperator in $\mathfrak{U}^-$ die Zerlegung

$$\mathbb{1} = |0\rangle\langle 0| + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1} |v_{k_1}\rangle\langle v_{k_1}| \, \mathrm{d}k_1 + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1 < k_2} |v^-_{k_1 k_2}\rangle\langle v^-_{k_1 k_2}| \, \mathrm{d}k_1 \, \mathrm{d}k_2 + \cdots \quad (25)$$

besitzt. Die Anwendung von $a_k^\dagger$ auf diese $\mathit{1}$ ergibt nach Gl. (22)

$$\boxed{a_k^\dagger = |v_k\rangle\langle 0| + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1} |v_{\overline{kk_1}}\rangle\langle v_{k_1}|\,\mathrm{d}k_1 + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1<k_2} |v_{\overline{kk_1k_2}}\rangle\langle v_{\overline{k_1k_2}}|\,\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_2 + \cdots} \,. \tag{26}$$

Will man hieraus eine Darstellung des adjungierten Operators a_k bekommen, so muß man lediglich die Reihenfolge der dyadischen Produkte vertauschen (Aufg. 43), d. h.

$$\boxed{a_k = |0\rangle\langle v_k| + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1} |v_{k_1}\rangle\langle v_{\overline{kk_1}}|\,\mathrm{d}k_1 + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1<k_2} |v_{\overline{k_1k_2}}\rangle\langle v_{\overline{kk_1k_2}}|\,\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_2 + \cdots} \,. \tag{27}$$

Wegen der Orthogonalität (21) und der Orthonormierung (11) der Vektoren entnehmen wir hieraus die Eigenschaften

$$\left.\begin{aligned}
a_k\,|0\rangle &= 0, \\
a_k\,|v_{k'}\rangle &= |0\rangle\langle v_k\,|\,v_{k'}\rangle = \delta(k,k')\,|0\rangle, \\
a_k\,|v_{\overline{k'k''}}\rangle &= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1} |v_{k_1}\rangle\langle v_{\overline{kk_1}}\,|\,v_{\overline{k'k''}}\rangle\,\mathrm{d}k_1 \\
&= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1} |v_{k_1}\rangle\big(\delta(k,k')\,\delta(k_1,k'') - \delta(k_1,k')\,\delta(k,k'')\big)\,\mathrm{d}k_1 \\
&= \delta(k,k')\,|v_{k''}\rangle - \delta(k,k'')\,|v_{k'}\rangle
\end{aligned}\right\} \tag{28}$$

usw. Allgemein ergibt sich

$$a_k\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle = \delta(k,k_1)\,|v_{\overline{k_2\ldots k_N}}\rangle - \delta(k,k_2)\,|v_{\overline{k_1k_3\ldots k_N}}\rangle + \cdots, \tag{29}$$

d. h., a_k führt einen Zustand aus $\mathfrak{U}_{\overline{N}}$ über in einen Zustand aus $\mathfrak{U}_{\overline{N-1}}$, wenn der Ausgangszustand ein Teilchen im Zustand k enthält. Da durch diesen Operator ein Teilchen vernichtet wird, nennt man a_k *Vernichtungsoperator*. Die Anwendung von a_k auf einen Vakuumzustand ergibt Null [Gl. (28_1)].

b) Vertauschungsrelationen

Wendet man auf einen Zustand $|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle$ zuerst $a_{k'}^\dagger$ und dann a_k an, so erhält man nach Gl. (22) und (29)

$$a_k\,a_{k'}^\dagger\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle = \delta(k,k')\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle - \delta(k,k_1)\,|v_{\overline{k'k_2\ldots k_N}}\rangle + \cdots, \tag{30}$$

geht man hingegen in der umgekehrten Reihenfolge vor, so resultiert

$$a_{k'}^\dagger\,a_k\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle = \qquad\qquad + \delta(k,k_1)\,|v_{\overline{k'k_2\ldots k_N}}\rangle - \cdots. \tag{31}$$

Da die untereinander stehenden Glieder gerade wegfallen, findet man durch Addition

$$(a_k\,a_{k'}^\dagger + a_{k'}^\dagger\,a_k)\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle = \delta(k,k')\,|v_{\overline{k_1\ldots k_N}}\rangle.$$

Weil man jeden Zustand $|\Phi^-\rangle$ aus $\mathfrak{U}^-$ nach $|v^-_{k_1 \dots k_N \dots}\rangle$ entwickeln kann, gilt diese Gleichung in Anwendung auf irgendeinen Vektor $|\Phi^-\rangle$, d. h., man erhält die Operatorgleichung

$$a_k a^\dagger_{k'} + a^\dagger_{k'} a_k = \delta(k, k') \, 1 .$$

Zusammen mit der oben abgeleiteten Beziehung (23) haben wir damit für die Fermionen-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren die *Antikommutatorrelationen*

$$\boxed{\begin{aligned} [a_k, a_{k'}]_+ &= 0 \\ [a^\dagger_k, a^\dagger_{k'}]_+ &= 0 \\ [a_k, a^\dagger_{k'}]_+ &= \delta(k, k') \, 1 \end{aligned}} \qquad (32)$$

gewonnen. — Führt man eine analoge Rechnung für *Bosonen* durch, so findet man für deren Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die entsprechenden Relationen mit *Kommutatoren* (vgl. 4.6 § 3a).

c) Das Transformationsverhalten der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Ausgehend von einem vollständigen, orthonormierten Satz von Einteilchenvektoren $|v_k\rangle$ und ihren antimetrisierten Produktzuständen $|v^-_{kk_1}\rangle$, $|v^-_{kk_1k_2}\rangle, \dots$ wurden die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren durch die Gleichungen (26) und (27) definiert. Auf dieselbe Weise kann man natürlich vorgehen, wenn man von anderen Eigenvektoren ausgeht. Wir wollen als solche speziell die Ort-Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathfrak{r}m}\rangle = |u_\mathfrak{r}\rangle |u^m\rangle$, $|u^-_{\mathfrak{r}m,\mathfrak{r}_1m_1}\rangle, \dots$ wählen. Dann werden durch

$$\boxed{\begin{aligned} \psi^\dagger_m(\mathfrak{r}) &= |u_{\mathfrak{r}m}\rangle \langle 0| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\mathfrak{r}_1 m_1} |u^-_{\mathfrak{r}m,\mathfrak{r}_1m_1}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}_1m_1}| \, d^3x_1 + \cdots \\ \psi_m(\mathfrak{r}) &= |0\rangle \langle u_{\mathfrak{r}m}| + \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\mathfrak{r}_1 m_1} |u_{\mathfrak{r}_1m_1}\rangle \langle u^-_{\mathfrak{r}m,\mathfrak{r}_1m_1}| \, d^3x_1 + \cdots \end{aligned}} \qquad (33)$$

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\psi^\dagger_m(\mathfrak{r})$, $\psi_m(\mathfrak{r})$ für ein Teilchen am Ort $\mathfrak{r}$ mit der Spinkomponente $m\hbar$ definiert, die wieder die Antikommutatorvertauschungsrelationen

$$\boxed{\begin{aligned} [\psi_m(\mathfrak{r}), \psi_{m'}(\mathfrak{r}')]_+ &= 0 \\ [\psi^\dagger_m(\mathfrak{r}), \psi^\dagger_{m'}(\mathfrak{r}')]_+ &= 0 \\ [\psi_m(\mathfrak{r}), \psi^\dagger_{m'}(\mathfrak{r}')]_+ &= \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}') \, \delta_{mm'} \, 1 \end{aligned}} \qquad (34)$$

erfüllen.

Den Zusammenhang zwischen den Vektoren $|v_k\rangle$, $|v_{kk_1}^-\rangle$, ... und $|u_{\mathfrak{r}m}\rangle$, $|u_{\mathfrak{r}m,\mathfrak{r}_1m_1}^-\rangle$, ... vermittelt die unitäre Matrix $\langle v_k \mid u_{\mathfrak{r}m}\rangle$ (vgl. Aufg. 109),

$$\left.\begin{aligned} |u_{\mathfrak{r}m}\rangle &= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k |v_k\rangle \langle v_k \mid u_{\mathfrak{r}m}\rangle \,\mathrm{d}k, \\ |u_{\mathfrak{r}m,\mathfrak{r}_1m_1}^-\rangle &= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk_1} |v_{kk_1}^-\rangle \langle v_k \mid u_{\mathfrak{r}m}\rangle \langle v_{k_1} \mid u_{\mathfrak{r}_1m_1}\rangle \,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k_1 . \\ &\vdots \end{aligned}\right\} \tag{35}$$

Welcher Zusammenhang besteht damit zwischen den Operatoren $\psi_m(\mathfrak{r})$ und a_k? Zur Beantwortung dieser Frage setzen wir die Transformation (35) in die Gl. (33_2) ein und erhalten

$$\begin{aligned} \psi_m(\mathfrak{r}) = & \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k |0\rangle \langle u_{\mathfrak{r}m} \mid v_k\rangle \langle v_k \mid \mathrm{d}k \\ & + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\mathfrak{r}_1m_1} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk_1k_1'} |v_{k_1}\rangle \langle v_{k_1} \mid u_{\mathfrak{r}_1m_1}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}_1m_1} \mid v_{k_1'}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}m} \mid v_k\rangle \langle v_{kk_1'}^- \mid \mathrm{d}^3x_1\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_1' \\ & + \cdots . \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile gibt die Summation über $\mathfrak{r}_1$ und m_1 gerade $\delta(k_1, k_1')$, so daß man auch noch die Integration über k_1' ausführen kann. Es resultiert

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{kk_1} |v_{k_1}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}m} \mid v_k\rangle \langle v_{kk_1}^- \mid \mathrm{d}k\,\mathrm{d}k_1 .$$

Entsprechend verfährt man mit allen weiteren Gliedern. Damit ergibt sich, daß die Operatoren $\psi_m(\mathfrak{r})$ aus den a_k einfach durch die unitäre Transformation

$$\boxed{\psi_m(\mathfrak{r}) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_k a_k \langle u_{\mathfrak{r}m} \mid v_k\rangle \,\mathrm{d}k} \tag{36}$$

auseinander hervorgehen. Umgekehrt erhält man die Operatoren a_k aus $\psi_m(\mathfrak{r})$ durch

$$a_k = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{\mathfrak{r}m} \psi_m(\mathfrak{r}) \langle v_k \mid u_{\mathfrak{r}m}\rangle \,\mathrm{d}^3x . \tag{37}$$

Die Herleitung der Transformation (36) ist natürlich unabhängig davon, daß wir $\mathfrak{r}, m$ als Ort und Spin interpretiert haben.

§ 6. Entwicklung eines Operators nach Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Für die Formulierung der Quantentheorie in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist es notwendig, die symmetrischen N-Teilchenoperatoren $\mathcal{L}$ als Funktion der a_k und $a_k^\dagger$ auszudrücken. Dazu gehen wir zunächst von der Vollständigkeit der Produktzustände $|v_{k_1}^1 v_{k_2}^2 \ldots v_{k_N}^N\rangle$ im unitären Raum $\mathfrak{U}_N$ aus,

so daß man (durch zweimaliges Einschieben einer $\mathbf{1}$) schreiben kann

$$\mathscr{L} = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k_1\ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k'_1\ldots k'_N} |v^1_{k_1} \ldots v^N_{k_N}\rangle \langle v^1_{k_1} \ldots v^N_{k_N} | \mathscr{L}\, v^1_{k'_1} \ldots v^N_{k'_N}\rangle \langle v^1_{k'_1} \ldots v^N_{k'_N}| \times \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k'_1 \ldots \mathrm{d}k'_N. \tag{38}$$

Handelt es sich bei den betrachteten Teilchen um identische Fermionen, so sind allein die antimetrischen Zustände aus $\mathfrak{U}_N^-$ von Interesse. In diesem Raum ist aber der Operator $\mathscr{L}$ mit $\mathscr{A}\,\mathscr{L}\,\mathscr{A}$ identisch. Multiplizieren wir daher die Gl. (38) von rechts und links mit $\mathscr{A}$, so erhalten wir, wenn wir nach Gl. (10) die orthonormierten Zustände $|v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle$ einführen,

$$\boxed{\mathscr{L} = \frac{1}{N!} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k_1\ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k'_1\ldots k'_N} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle \langle v^1_{k_1} \ldots v^N_{k_N}| \mathscr{L}\, v^1_{k'_1} \ldots v^N_{k'_N}\rangle \langle v^-_{k'_1\ldots k'_N}| \times \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k'_1 \ldots \mathrm{d}k'_N \quad \text{im } \mathfrak{U}_N^-}\,. \tag{39}$$

Die in dieser Formel auftretenden Matrixelemente von $\mathscr{L}$ sind nach wie vor in den Produktzuständen zu bilden.

a) Entwicklung einer Summe von Einteilchen-Operatoren

Als erstes wichtiges Beispiel behandeln wir einen N-Teilchen-Operator $\mathscr{L}$, der sich additiv aus N *Ein*teilchen-Operatoren zusammensetzt

$$\mathscr{L} = \sum_{\nu=1}^{N} f^\nu. \tag{40}$$

Die Operatoren f^ν sind also lauter *gleiche* Operatorfunktionen. f^ν bezieht sich auf das ν-te Teilchen.[1]) Die Matrixelemente von $\sum f^\nu$, gebildet in den Produktzuständen, vereinfachen sich in diesem Fall zu

$$\langle v^1_{k_1} \ldots v^N_{k_N}| \sum_{\nu=1}^{N} f^\nu\, v^1_{k'_1} \ldots v^N_{k'_N}\rangle = \langle v^1_{k_1} | f^1\, v^1_{k'_1}\rangle\, \delta(k_2, k'_2) \ldots \delta(k_N, k'_N) + \\ + \cdots \\ + \delta(k_1, k'_1)\, \delta(k_2, k'_2) \ldots \langle v^N_{k_N} | f^N\, v^N_{k'_N}\rangle.$$

Setzen wir diese Summe in Gl. (39) ein, so erhalten wir im $\mathfrak{U}_N^-$

$$\sum_{\nu=1}^{N} f^\nu = \frac{1}{N!} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k_1\ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k'_1} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle \langle v^1_{k_1} | f^1\, v^1_{k'_1}\rangle \langle v^-_{k'_1 k_2\ldots k_N}| \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k'_1 + \\ + \frac{1}{N!} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k_1\ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k'_2} |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle \langle v^2_{k_2} | f^2\, v^2_{k'_2}\rangle \langle v^-_{k_1 k'_2\ldots k_N}| \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k'_2 + \\ + \cdots. \tag{41}$$

[1]) In der direkten Produktschreibweise von 2.4 § 2 lautet Gl. (40) also ausführlich $f \times \mathbf{1} \times \mathbf{1} \times \ldots + \mathbf{1} \times f \times \mathbf{1} \times \ldots + \ldots$.

Im zweiten Term nehmen wir eine Umbezeichnung der Integrationsvariablen vor: $k_1 \to k_2$, $k_2 \to k_1$, $k_2' \to k_1'$. Das Matrixelement lautet dann $\langle v_{k_1}^2 \mid f^2\, v_{k_1'}^2 \rangle$. Weil alle f^ν dieselben Einteilchenoperatoren sind, sind ihre Matrixelemente unabhängig von den Teilchenindizes

$$\langle v_{k_1}^1 \mid f^1\, v_{k_1'}^1 \rangle = \langle v_{k_1}^2 \mid f^2\, v_{k_1'}^2 \rangle = \cdots,$$

so daß wir für sie einfach schreiben können

$$\langle v_{k_1} \mid f\, v_{k_1'} \rangle = f(k_1, k_1'). \tag{42}$$

Berücksichtigt man ferner die Antimetrie der Zustände $|v^-\rangle$, so kann man $|v^-_{k_2 k_1 \ldots k_N}\rangle$ durch $-|v^-_{k_1 k_2 \ldots k_N}\rangle$ ersetzen. Damit ist gezeigt, daß der zweite Term von Gl. (41) mit dem ersten identisch ist. Verfährt man ebenso mit den restlichen Summanden von (41), so erhält man schließlich

$$\sum_{\nu=1}^{N} f^\nu = \frac{1}{(N-1)!} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1 \ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1'} |v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle\, f(k_1, k_1') \langle v^-_{k_1' \ldots k_N}|\, \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k_1'$$

$$= \frac{1}{(N-1)!} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1 \ldots k_N} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1'} a^\dagger_{k_1} |v^-_{k_2 \ldots k_N}\rangle\, f(k_1, k_1')\, \langle v^-_{k_2 \ldots k_N}|\, a_{k_1'}\, \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k_1'.$$

Wegen der Vollständigkeit der $|v^-_{k_2 \ldots k_N}\rangle$ im $\mathfrak{U}^-_{N-1}$ [Gl. (15)] ergibt die Integration über $k_2, \ldots, k_N$ [einschließlich des Faktors $(N-1)!^{-1}$] gerade $\mathbf{1}$. Schreiben wir statt $k_1 \to k$ und statt $k_1' \to k'$, so erhalten wir das Ergebnis

$$\boxed{\sum_\nu f^\nu = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k,k'} a^\dagger_k\, f(k, k')\, a_{k'}\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'} \;.[1) \tag{43}$$

Damit ist die Summe über Einteilchenoperatoren $\sum f^\nu$ *als Linearkombination der Operatoren* $a^\dagger_k\, a_{k'}$ *ausgedrückt. Die Koeffizienten dieser Linearkombination sind die Matrixelemente* $f(k, k')$ *von* f *im Einteilchen-Raum* $\mathfrak{U}_1$ [Gl. (42)]. Die Formel erlaubt folgende anschauliche Deutung: Es wird ein Teilchen im Zustand k' vernichtet und dafür ein Teilchen im Zustand k erzeugt; das Gewicht, mit dem dies geschieht, ist das Matrixelement $f(k, k')$.

---

[1]) Diese Gleichung ist zunächst für beliebiges, aber festes N, d. h. in irgendeinem $\mathfrak{U}^-_N$, bewiesen. Multiplizieren wir von vorne und hinten mit den Projektoren $\mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N}$ und summieren über N, so erhalten wir — weil $\mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N}$ mit der rechten Seite vertauscht — die im $\mathfrak{U}^-$ gültige Beziehung

$$\sum_N \left(\mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N} \sum_{\nu=1}^{N} f^\nu\, \mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N} \right) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k,k'} a^\dagger_k\, f(k, k')\, a_{k'}\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'. \tag{43a}$$

Die linke Seite stellt die Summe von Einteilchenoperatoren im unitären Raum $\mathfrak{U}^-$ variabler Teilchenzahl dar. Wir schreiben dafür abkürzend $\sum_\nu f^\nu$ und gelangen damit zur Formulierung (43), gültig im $\mathfrak{U}^-$.

Beispiele: α) Der *Gesamtimpulsoperator* lautet

$$\sum_\nu \vec{p}^\nu = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_{k,k'} a_k^\dagger\, \mathfrak{p}(k,k')\, a_{k'}\, dk\, dk' \tag{44}$$

wobei

$$\mathfrak{p}(k,k') = \langle v_k \mid \vec{p}\, v_{k'}\rangle$$

die Matrixelemente des Einteilchen-Impulsoperators $\vec{p}$ sind. Wählt man als $|v_k\rangle$ die Ort-Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathfrak{r}m}\rangle$, so ist

$$\langle u_{\mathfrak{r}m} \mid \vec{p}\, u_{\mathfrak{r}'m'}\rangle = -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathfrak{r}'}\, \delta(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}')\, \delta_{mm'} \tag{45}$$

und man erhält nach Gl. (5.1–29)

$$\boxed{\sum_\nu \vec{p}^\nu = \frac{\hbar}{i} \sum_m \int_{\mathfrak{r}} \psi_m^\dagger(\mathfrak{r})\, \nabla\, \psi_m(\mathfrak{r})\, d^3x}\,. \tag{46}$$

In den Impuls-Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathfrak{p}m}\rangle$ gilt

$$\langle u_{\mathfrak{p}m} \mid \vec{p}\, u_{\mathfrak{p}'m'}\rangle = \mathfrak{p}'\, \delta(\mathfrak{p}-\mathfrak{p}')\, \delta_{mm'}, \tag{47}$$

so daß folgt

$$\sum_\nu \vec{p}^\nu = \sum_m \int_{\mathfrak{p}} \mathfrak{p}\, a_m^\dagger(\mathfrak{p})\, a_m(\mathfrak{p})\, d^3p. \tag{48}$$

β) Für die *Summe von Einteilchen*-Hamilton-*Operatoren*

$$\sum_\nu h^\nu = \sum_\nu \left(\frac{1}{2m} \vec{p}^{\nu 2} + \mathscr{V}(\vec{x}^\nu)\right) \tag{49}$$

ergibt sich

$$\sum_\nu h^\nu = \mathop{\Sigma\!\!\!\!\int}_{k,k'} a_k^\dagger\, \varepsilon(k,k')\, a_{k'}\, dk\, dk' \tag{50}$$

mit

$$\varepsilon(k,k') = \langle v_k \mid \frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}) \mid v_{k'}\rangle. \tag{51}$$

In der Ort-Spin-Darstellung ist

$$\varepsilon(\mathfrak{r}\, m, \mathfrak{r}'\, m') = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathfrak{r}'} + V(\mathfrak{r}')\right) \delta(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}')\, \delta_{mm'}, \tag{52}$$

so daß man erhält

$$\boxed{\sum_\nu h^\nu = \sum_m \int_{\mathfrak{r}} \psi_m^\dagger(\mathfrak{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right) \psi_m(\mathfrak{r})\, d^3x}\,. \tag{53}$$

Die Impuls-Spin-Darstellung hingegen führt auf

$$\sum_\nu h^\nu = \sum_m \int_{\mathfrak{p}} \int_{\mathfrak{p}'} a_m^\dagger(\mathfrak{p}) \left(\frac{\mathfrak{p}^2}{2m} \delta(\mathfrak{p}-\mathfrak{p}') + V(\mathfrak{p},\mathfrak{p}')\right) a_m(\mathfrak{p}')\, d^3p\, d^3p', \tag{54}$$

dabei sind $V(\mathfrak{p}, \mathfrak{p}')$ die Matrixelemente des Potentials, gebildet mit den Impulseigenvektoren. — Identifiziert man die $|v_k\rangle$ mit den Eigenvektoren von $\mathscr{h}$, so ist

$$\varepsilon(k, k') = \varepsilon_k \, \delta(k, k'), \tag{55}$$

und aus Gl. (50) wird

$$\boxed{\sum_\nu \mathscr{h}^\nu = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \varepsilon_k \, a_k^\dagger \, a_k \, \mathrm{d}k} \tag{56}$$

(ε_k sind also die Eigenwerte des Einteilchen-HAMILTON-Operators $\mathscr{h}$).

b) Besetzungszahl-Operatoren

Die Darstellungen (48) und (56) zeichnen sich dadurch aus, daß in ihnen die Matrixelemente der Einteilchenoperatoren diagonal sind. Wählt man allgemein solche Einteilchenvektoren $|v_k\rangle$, die Eigenvektoren von $\mathscr{f}$ sind,

$$\mathscr{f} \, |v_k\rangle = f_k \, |v_k\rangle, \tag{57}$$

so wird

$$f(k, k') = f_k \, \delta(k, k'), \tag{58}$$

und die Gl. (43) vereinfacht sich zu

$$\boxed{\sum_\nu \mathscr{f}^\nu = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k f_k \, \mathscr{N}_k \, \mathrm{d}k} \, . \tag{59}$$

Dabei ist

$$\boxed{\mathscr{N}_k = a_k^\dagger \, a_k} \tag{60}$$

gesetzt worden. Diese HERMITEschen Größen nennt man *Besetzungszahl-Operatoren.* Nach Gl. (31) ist

$$\mathscr{N}_k \, |v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle = \delta(k, k_1) \, |v^-_{k k_2 \ldots k_N}\rangle + \delta(k, k_2) \, |v^-_{k_1 k \ldots k_N}\rangle + \cdots, \tag{61}$$

d. h., alle Vektoren $|v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle$, in denen kein Index mit k übereinstimmt, sind Eigenvektoren von $\mathscr{N}_k$ zum Eigenwert 0, während die Vektoren $|v^-_{k_1 \ldots k_N}\rangle$, in denen irgendein Index gleich k ist, Eigenvektoren zum Eigenwert 1 sind (wenn wir *ein* diskretes k voraussetzen[1]). Der Besetzungszahl-Operator (60) hat also die Eigenwerte

$$N_k = 0, 1, \tag{62}$$

ein erneuter Ausdruck des PAULI-Prinzips: In einem Zustand k kann sich höchstens *ein* Teilchen befinden.

Die Bedeutung der Besetzungszahl-Operatoren können wir uns auch folgendermaßen klarmachen: Wir setzen in Gl. (43) für $\mathscr{f}$ den Projektionsoperator

---

[1]) Bei kontinuierlichem k ist über ein kleines Δk-Intervall zu integrieren.

$\mathscr{P}_{|v_k\rangle} = |v_k\rangle\langle v_k|$ und erhalten

$$\sum_\nu \mathscr{P}^\nu_{|v_k\rangle} = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k'k''} a^\dagger_{k'} \langle v_{k'} | v_k\rangle \langle v_k | v_{k''}\rangle a_{k''} \,\mathrm{d}k'\,\mathrm{d}k'',$$

d. h.

$$\boxed{\sum_\nu \mathscr{P}^\nu_{|v_k\rangle} = a^\dagger_k a_k}. \tag{63}$$

Weil $\mathscr{P}_{|v_k\rangle}$ die Observable „Besitzt das Teilchen den Meßwert k?" darstellt, bedeutet der Operator $\sum\limits_\nu \mathscr{P}^\nu_{|v_k\rangle} = \mathscr{N}_k$ die Observable „Wie viele Teilchen haben den Meßwert k?".

Beispiel: Der Operator

$$\sum_\nu \mathscr{P}^\nu_{|u_{\mathfrak{r}m}\rangle}\,\mathrm{d}^3x = \psi^\dagger_m(\mathfrak{r})\,\psi_m(\mathfrak{r})\,\mathrm{d}^3x \tag{64}$$

stellt die Observable „Wie viele Teilchen befinden sich im Volumenelement d^3x an der Stelle $\mathfrak{r}$ und haben die Spinkomponente $m\hbar$?" dar. Summiert man über die Spineinstellungen, so ergibt sich (vgl. Gl. (2.3–18)]

$$\boxed{\sum_\nu \mathscr{P}^\nu_{\mathfrak{u}_\mathfrak{r}} = \sum_\nu \delta(\vec{x}^\nu - \mathfrak{r}\,1) = \sum_m \psi^\dagger_m(\mathfrak{r})\,\psi_m(\mathfrak{r})}, \tag{65}$$

der *Operator der Teilchendichte am Ort* $\mathfrak{r}$.

Die Summe

$$\mathscr{N} = \sum_k \mathscr{N}_k = \sum_k a^\dagger_k a_k \tag{66}$$

ist der *Operator der Gesamtteilchenzahl.* Seine Eigenwerte sind die ganzen Zahlen

$$N = \sum_k N_k = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{67}$$

Zum Eigenwert N gehört der Eigenraum $\mathfrak{U}^{\mp}_N$.

Bevor wir einige wichtige *Vertauschungsrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Fermionen* herleiten, bemerken wir, daß für irgendwelche Operatoren $\mathscr{F}_1$, $\mathscr{F}_2$ und $\mathscr{G}$ die Rechenregeln

$$[\mathscr{F}_1\mathscr{F}_2, \mathscr{G}]_- = \mathscr{F}_1[\mathscr{F}_2, \mathscr{G}]_\mp \pm [\mathscr{F}_1, \mathscr{G}]_\mp \mathscr{F}_2 \tag{68}$$

und

$$[\mathscr{F}_1\mathscr{F}_2, \mathscr{G}]_+ = \mathscr{F}_1[\mathscr{F}_2, \mathscr{G}]_\pm \mp [\mathscr{F}_1, \mathscr{G}]_\mp \mathscr{F}_2 \tag{69}$$

gelten, die man durch einfaches Einsetzen in die Definition der Kommutatoren und Antikommutatoren verifiziert. Aus Gl. (32) und Gl. (68) ergibt sich

$$\boxed{\begin{aligned}[a^\dagger_{k'} a_{k''}, a_k] &= -\,\delta(k', k)\,a_{k''}\\ [a^\dagger_{k'} a_{k''}, a^\dagger_k] &= +\,\delta(k'', k)\,a^\dagger_{k'}\end{aligned}}, \tag{70}$$

also insbesondere

$$[\mathcal{N}_{k'}, a_k] = -\,\delta(k', k)\, a_{k'}, \qquad [\mathcal{N}_{k'}, a_k^\dagger] = +\,\delta(k', k)\, a_{k'}^\dagger. \tag{71}$$

Hieraus folgt

$$[\mathcal{N}_{k'}, a_{k_1}^\dagger a_{k_2}] = \delta(k', k_1)\, a_{k'}^\dagger a_{k_2} - \delta(k', k_2)\, a_{k_1}^\dagger a_{k'}, \tag{72}$$

so daß man

$$[\mathcal{N}_{k'}, \mathcal{N}_k] = \mathcal{O} \tag{73}$$

und

$$[\mathcal{N}, a_{k_1}^\dagger a_{k_2}] = \mathcal{O} \tag{74}$$

erhält. Die Summe von Einteilchenoperatoren (43) vertauscht damit mit $\mathcal{N}$, ein Ergebnis, das auf Grund der Herleitung von Gl. (43) selbstverständlich bestehen muß. — Die Beziehungen (70) bis (74) gelten insbesondere natürlich auch, wenn man a_k durch $\psi_m(\mathfrak{r})$ ersetzt.

c) Die Fermi-Verteilung

Von einem System unabhängiger Fermionen möge die mittlere Teilchenzahl

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \operatorname{Sp} \rho\, \mathcal{N}_k \tag{75}$$

berechnet werden, die sich im thermischen Gleichgewicht in einem Energiezustand k befinden. Liegt das System mit einer mittleren Energie

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \operatorname{Sp} \rho\, \mathcal{H} \tag{76}$$

und einer mittleren Teilchenzahl

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \operatorname{Sp} \rho\, \mathcal{N} \tag{77}$$

vor, so ist es im $\mathfrak{U}^-$ durch den großkanonischen statistischen Operator (3.7–31$_g$)

$$\rho = \frac{e^{-\beta \mathcal{H} + \nu \mathcal{N}}}{\operatorname{Sp} e^{-\beta \mathcal{H} + \nu \mathcal{N}}} \tag{78}$$

zu beschreiben (absolute Temperatur $T = \dfrac{1}{k\beta}$, chemisches Potential pro Teilchen $\zeta = \nu/\beta$). Wegen

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon_k \mathcal{N}_k \quad \text{und} \quad \mathcal{N} = \sum_k \mathcal{N}_k \tag{79}$$

nimmt Gl. (78) die Gestalt

$$\rho = \frac{y_1^{\mathcal{N}_1} y_2^{\mathcal{N}_2} \ldots}{\operatorname{Sp}(y_1^{\mathcal{N}_1} y_2^{\mathcal{N}_2} \ldots)} \tag{80}$$

an, wenn wir die Abkürzung

$$y_k = e^{-\beta \varepsilon_k + \nu} \tag{81}$$

einführen.

Die Spur (75) berechnen wir in der Besetzungszahl-Darstellung,

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \frac{\sum\limits_{N_1 N_2 \ldots N_k \ldots} y_1^{N_1} y_2^{N_2} \ldots y_k^{N_k} \ldots N_k}{\sum\limits_{N_1 N_2 \ldots N_k \ldots} y_1^{N_1} y_2^{N_2} \ldots y_k^{N_k}} = \frac{\sum\limits_{N_k} y_k^{N_k} N_k}{\sum\limits_{N_k} y_k^{N}} = \frac{y_k}{1+y_k}. \tag{82}$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß nach Gl. (62) N_k nur die Werte 0 und 1 annehmen kann. Die mittlere Teilchenzahl in einem Energiezustand k beträgt also im thermischen Gleichgewicht

$$\boxed{\langle \mathcal{N}_k \rangle = \frac{1}{e^{-\nu+\beta\varepsilon_k}+1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\zeta)}+1}}\ {}^{1)} \tag{83}$$

(Fermi-*Verteilung*). Am absoluten Nullpunkt ($T \to 0$, $\beta \to \infty$) wird

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle^0 = \begin{cases} 0 \text{ für } \varepsilon_k > \zeta^0, \\ 1 \text{ für } \varepsilon_k < \zeta^0, \end{cases} \tag{84}$$

d. h., alle Energiezustände k, die zu Einteilchenenergien ε_k gehören, die kleiner als die „Fermi-Kante" ζ^0 ($= \zeta$ für $T = 0$) sind, sind mit *einem* Fermion besetzt, während alle Zustände, die zu höheren Energien gehören, unbesetzt sind. Bei endlichen Temperaturen hingegen bestehen nach Gl. (83) auch für die höheren Energien endliche Erwartungswerte $\langle \mathcal{N}_k \rangle$. Diese sind eine Funktion von β, ν und den äußeren Parametern, wie Volumen V, Magnetfeld H usw., von denen die Energien $\varepsilon_k = \varepsilon_k(V, H, \ldots)$ abhängen,

$$\langle \mathcal{N}_k \rangle = \langle \mathcal{N}_k \rangle (\beta, \nu, V, H, \ldots). \tag{85}$$

Die mittlere Gesamtteilchenzahl ist

$$\langle \mathcal{N} \rangle = \sum_k \frac{1}{e^{-\nu+\beta\varepsilon_k}+1} = \langle \mathcal{N} \rangle (\beta, \nu, V, H, \ldots). \tag{86}$$

Diese Gleichung kann man dazu benutzen, um das chemische Potential ν als Funktion von $\langle \mathcal{N} \rangle$, β, V, H,... zu bestimmen. Die innere Energie U der Fermionen ergibt sich aus

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_k \frac{\varepsilon_k}{e^{-\nu+\beta\varepsilon_k}+1} = U(\beta, \nu, V, H, \ldots) \tag{87}$$

(kalorische Zustandsgleichung).

d) Die Bewegungsgleichung für ψ und a

Für den Operator $\mathring{a}$ gilt nach Gl. (3.2–29) der Zusammenhang

$$\mathring{a}_k = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, a_k]. \tag{88}$$

[1]) In dieser Formel numeriert k die Energieeigenvektoren. Um die mittlere Teilchenzahl pro Energieniveau ε_k zu erhalten, muß man noch mit dem Entartungsgrad multiplizieren.

Setzt man für $\mathcal{H}$ den HAMILTON-Operator (50) ein und beachtet man die Vertauschungsrelation (70_1), so ergibt sich

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathring{a}_k = \sum_{k'} \varepsilon(k, k')\, a_{k'}\, \mathrm{d}k'}\,. \tag{89}$$

In der Ort-Spin-Darstellung lautet Gl. (88)

$$\mathring{\psi}_m(\mathfrak{r}) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathcal{H}, \psi_m(\mathfrak{r})], \tag{90}$$

und Gl. (89) geht nach Gl. (52) über in

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\mathring{\psi}_m(\mathfrak{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right)\psi_m(\mathfrak{r})}\,. \tag{91}$$

Wir erhalten also gerade die SCHRÖDINGER*sche Materiefeldgleichung* (1.3–32) *in Operatorform.* Die Gl. (89) entspricht der klassischen Gleichung (1.5–78). Wir werden im nächsten Kapitel sehen, daß man diese Operatorgleichungen und alle anderen hier angegebenen Beziehungen tatsächlich auch durch die Methode der *Feldquantisierung* erhalten kann. Damit ist dann explizit die Äquivalenz der Quantentheorie des Teilchenbildes mit jener des Feldbildes nachgewiesen.

Im HEISENBERG-Bild wird die Gl. (89) zu dem Differentialgleichungssystem

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}a_k^H(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{k'} \varepsilon(k, k')\, a_{k'}^H(t)\, \mathrm{d}k' \tag{92}$$

für die Operatorfunktionen $a_k^H(t)$. Für die Operatoren $\psi_m^H(\mathfrak{r}, t)$ liefert Gl. (91) die partielle Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial\psi_m^H(\mathfrak{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right)\psi_m^H(\mathfrak{r}, t). \tag{93}$$

Wenden wir diese Gleichung auf den Zustandsvektor $|\Phi^H\rangle$ an, so werden wir nach Multiplikation mit $\langle 0|$ wegen

$$\boxed{\langle 0|\, \psi_m^H(\mathfrak{r}, t)\, \Phi^H\rangle = \langle u_{\mathfrak{r}m}^H(t)\, |\Phi^H\rangle = \Phi_m(\mathfrak{r}, t)} \tag{94}$$

auf die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial\Phi_m(\mathfrak{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right)\Phi_m(\mathfrak{r}, t)} \tag{95}$$

für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi_m(\mathfrak{r}, t)$ *eines* Teilchens geführt.

e) Entwicklung von Wechselwirkungsoperatoren

Die Wechselwirkung zwischen Teilchen läßt sich praktisch immer als *Summe von Paarwechselwirkungen* schreiben; ein wichtiges Beispiel hierfür ist die

Coulombsche Wechselwirkung

$$\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{q^2}{|\vec{x}^\mu - \vec{x}^\nu|}. \tag{96}$$

Wir wollen allgemein einen Wechselwirkungsoperator, der eine Summe über *gleiche* Paarwechselwirkungsoperatoren $\hbar^{\mu\nu}$ ist,

$$\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} \hbar^{\mu\nu} \tag{97}$$

auf Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren umschreiben. Für diese Rechnung geht man wieder von der allgemeinen Beziehung (39) aus und verfährt dann völlig analog zur Herleitung von Gl. (43). Man findet (Aufg. 112)

$$\boxed{\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_1 k_2 k_1' k_2'} a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} \, \varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2') \, a_{k_2'} a_{k_1'} \, \mathrm{d}k_1 \, \mathrm{d}k_2 \, \mathrm{d}k_1' \, \mathrm{d}k_2'}\,. \tag{98}$$

Dabei sind

$$\begin{aligned} \varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2') &= \langle v^1_{k_1} v^2_{k_2} \,|\, \hbar^{12} \, v^1_{k_1'} v^2_{k_2'} \rangle \\ &= \varepsilon(k_2, k_1; k_2', k_1') \end{aligned} \tag{99}$$

die Matrixelemente des Operators $\hbar^{12}$ irgend zweier Teilchen 1 und 2. Die Form (98) eines Wechselwirkungsoperators ist heute fast stets der Ausgangspunkt der quantentheoretischen Behandlung eines Vielteilchenproblems. Ein Term der Summe (98) läßt sich deuten als Vernichtung zweier Teilchen in den Zuständen k_1', k_2' und Erzeugung zweier Teilchen in den Zuständen k_1, k_2. Das Gewicht dafür ist das Matrixelement $\varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2')$.

Im Beispiel der Coulombschen Wechselwirkung lauten die Matrixelemente in der Ort-Spin-Darstellung

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathfrak{r}_1 m_1, \mathfrak{r}_2 m_2; \mathfrak{r}_1' m_1', \mathfrak{r}_2' m_2') &= \left\langle v^1_{\mathfrak{r}_1 m_1} v^2_{\mathfrak{r}_2 m_2} \,\middle|\, \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} \, v^1_{\mathfrak{r}_1' m_1'} v^2_{\mathfrak{r}_2' m_2'} \right\rangle \\ &= \frac{q^2}{|\mathfrak{r}_1' - \mathfrak{r}_2'|} \, \delta(\mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_1') \, \delta(\mathfrak{r}_2 - \mathfrak{r}_2') \, \delta_{m_1 m_1'} \, \delta_{m_2 m_2'}, \end{aligned} \tag{100}$$

so daß der Operator (96) die Form

$$\mathscr{H}_W = \frac{q^2}{2} \sum_{m_1 m_2} \int_{\mathfrak{r}_1 \mathfrak{r}_2} \frac{\psi^\dagger_{m_1}(\mathfrak{r}_1) \, \psi^\dagger_{m_2}(\mathfrak{r}_2) \, \psi_{m_2}(\mathfrak{r}_2) \, \psi_{m_1}(\mathfrak{r}_1)}{|\mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2|} \, \mathrm{d}^3x_1 \, \mathrm{d}^3x_2 \tag{101}$$

annimmt (vgl. auch 4.6 § 7).

f) Beispiel: Der Heisenbergsche Austauschoperator

Man ist heute sicher, daß der Ferromagnetismus eine Folge der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen im Festkörper ist. Die Ursache dafür, daß diese elektrostatische Energie ein magnetisches Phänomen bewirken kann, liegt im Pauli-Prinzip begründet: Eine in den Ortsvariablen wirksame

Wechselwirkung äußert sich im Spin, weil die Gesamteigenfunktion der Elektronen, in denen Orts- und Spinvariablen zu berücksichtigen sind, stets antimetrisch sein müssen. Mit Hilfe der Darstellung (98) läßt sich die Umformung der COULOMB-Energie auf Spinoperatoren verhältnismäßig einfach durchführen.

Für diese Herleitung machen wir folgende vereinfachende Annahme: Jedes Atom des Kristalls besitze ein Leuchtelektron, das sich in einem s-Zustand ($l = 0$) befinde (andere Zustände der Elektronen werden nicht betrachtet). In den Einelektron-Eigenvektoren $|v_k\rangle$ ist daher die Quantenzahl k durch zwei Indizes n und m zu ersetzen

$$|v_k\rangle \rightarrow |v_{nm}\rangle .$$

Dabei numeriert n das Zentrum (Atom), bei welchem sich das Elektron befindet, und m bezeichnet die beiden Spineinstellmöglichkeiten $+$ und $-$ der Elektronen.[1]) An Stelle der Operatoren a_k schreiben wir entsprechend a_{nm}.

Der Operator der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen nimmt daher nach Gl. (98) die Gestalt

$$\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_1' n_2'}} \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_1' m_2'}} a^\dagger_{n_1 m_1} a^\dagger_{n_2 m_2} \langle v^1_{n_1 m_1} v^2_{n_2 m_2} | \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} v^1_{n_1' m_1'} v^2_{n_2' m_2'} \rangle a_{n_2' m_2'} a_{n_1' m_1'}$$

an. Weil aber $\frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|}$ auf die Spinzustände überhaupt nicht wirkt, ist das Matrixelement proportional zu $\delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}$, und wir erhalten

$$\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ n_1' n_2'}} \sum_{m_1 m_2} a^\dagger_{n_1 m_1} a^\dagger_{n_2 m_2} \langle v^1_{n_1} v^2_{n_2} | \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} v^1_{n_1'} v^2_{n_2'} \rangle a_{n_2' m_2} a_{n_1' m_1} . \tag{102}$$

Da wir nur eine solche Konfiguration betrachten wollen, bei der jeweils genau *ein* Elektron bei jedem Zentrum sich befindet,

$$\mathscr{N}_{n+} + \mathscr{N}_{n-} = 1 , \tag{103}$$

gibt es für die Quantenzahlen n_1' und n_2' nur die beiden Möglichkeiten

$$\begin{aligned} & n_1' = n_1, \; n_2' = n_2 \quad [C] \\ \text{und} \quad & n_1' = n_2, \; n_2' = n_1 \quad [A]. \end{aligned} \tag{104}$$

Wendet man nämlich etwa einen Operator $a^\dagger_{1-} a^\dagger_{2+} a_{3+} a_{4-}$, der diese Bedingung verletzt, z. B. auf einen Spinzustand $(\underset{1}{\uparrow}, \underset{2}{\downarrow}, \underset{3}{\uparrow}, \underset{4}{\downarrow})$ an, so erhält man $(\underset{1}{\uparrow\downarrow}, \underset{2}{\uparrow\downarrow}, \underset{3}{0}, \underset{4}{0})$, einen Zustand, bei welchem in den Lagen 1 und 2 zwei Elektronen und in den Lagen 3 und 4 keine Elektronen sitzen.

[1]) Man könnte daran denken, für $|v_{nm}\rangle$ einfach Atomfunktionen an der Lage n zu verwenden. Für verschiedene Lagen sind diese jedoch nicht orthogonal, so daß man die Beziehung (11) nicht ohne weiteres verwenden kann. Man benützt daher für die $|v_{nm}\rangle$ die sog. WANNIER-Funktionen, die die gewünschten Orthogonalitätseigenschaften besitzen und die sich näherungsweise wie Atomfunktionen verhalten.

Der Wechselwirkungsoperator zerfällt damit in zwei Anteile,

$$\mathcal{H}_W = \mathcal{H}_C + \mathcal{H}_A,$$

wobei

$$\mathcal{H}_C = \frac{1}{2} \sum_{n_1 n_2} \sum_{m_1 m_2} a^\dagger_{n_1 m_1} a^\dagger_{n_2 m_2} K_{n_1 n_2} a_{n_2 m_2} a_{n_1 m_1}$$

und

$$\mathcal{H}_A = \frac{1}{2} \sum_{n_1 n_2} \sum_{m_1 m_2} a^\dagger_{n_1 m_1} a^\dagger_{n_2 m_2} J_{n_1 n_2} a_{n_1 m_2} a_{n_2 m_1} \tag{105}$$

ist. Wegen Gl. (32_1) und der Nebenbedingung (103) ist dabei $n_1 \neq n_2$. Die Matrixelemente

$$K_{n_1 n_2} = \langle v^1_{n_1} v^2_{n_2} \mid \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} \, v^1_{n_1} v^2_{n_2} \rangle \tag{106}$$

nennt man COULOMB-*Integrale* und

$$J_{n_1 n_2} = \langle v^1_{n_1} v^2_{n_2} \mid \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} \, v^1_{n_2} v^2_{n_1} \rangle \tag{107}$$

Austauschintegrale (vgl. 4.4 § 1).

Jetzt führen wir die folgenden Kombinationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein

$$\begin{aligned} s_{n(+)} &= \hbar\, a^\dagger_{n+} a_{n-}, \\ s_{n(-)} &= \hbar\, a^\dagger_{n-} a_{n+}, \\ s_{n(z)} &= \frac{\hbar}{2} (a^\dagger_{n+} a_{n+} - a^\dagger_{n-} a_{n-}) = \frac{\hbar}{2} (\mathcal{N}_{n+} - \mathcal{N}_{n-}). \end{aligned} \tag{108}$$

Mit Hilfe der Vertauschungsrelationen der a und $a^\dagger$ kann man leicht nachweisen (Aufg. 114), daß die so definierten Operatoren s gerade die Spin-Vertauschungsrelationen (4.3-1) erfüllen. Sie können daher als Spinoperatoren der Lage n interpretiert werden.

Unter Benutzung der Vertauschungsrelationen und der Nebenbedingung (103) lassen sich die Operatoren $\mathcal{H}_C$ und $\mathcal{H}_A$ nach einer kleinen Rechnung (Aufg. 115) in die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_C &= \frac{1}{2} \sum_{n_1 \neq n_2} K_{n_1 n_2} \mathbb{1}, \\ \mathcal{H}_A &= - \sum_{n_1 \neq n_2} J_{n_1 n_2} \left(\frac{1}{\hbar^2} \vec{s}_{n_1} \vec{s}_{n_2} + \frac{1}{4} \mathbb{1} \right) \end{aligned} \tag{109}$$

bringen. Den spinabhängigen Anteil

$$\boxed{\mathcal{H}_H = - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n_1 \neq n_2} J_{n_1 n_2} \vec{s}_{n_1} \vec{s}_{n_2}} \tag{110}$$

nennt man den HEISENBERG*schen Austauschoperator*. Er ist die Grundlage für die gesamte Theorie des Ferro- und Antiferromagnetismus.

Aufg. 112: Man zeige die Gültigkeit der Umformung (98).

Aufg. 113: Der HAMILTON-Operator habe die Gestalt $\mathscr{H} = \sum \mathscr{h}^{\nu} + \frac{1}{2} \sum \mathscr{h}^{\mu\nu}$. Was ergibt sich für die Operatoren $\mathring{a}_k$ und $\mathring{\psi}$?

Aufg. 114: Man zeige, daß die Operatoren (108) die Vertauschungsrelationen der Spinkomponenten erfüllen.

Aufg. 115: Man führe die Umformung der Operatoren (105) auf die Gestalt (109) durch.

Sechstes Kapitel

Das quantisierte Schrödinger-Feld[1]

Durch die Zusammensetzung der unitären Räume verschiedener Teilchenzahl konnten wir im vorangehenden Kapitel eine Formulierung der Quantentheorie gewinnen, in der u. a. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eines Teilchens auftreten, die den Gleichungen des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes genügen. Einen direkten Zugang erhalten wir, wenn wir nicht von der Quantentheorie des Teilchenbildes ausgehen, sondern das SCHRÖDINGERsche Materiefeld quantisieren.[2] Es wird sich zeigen, daß wir damit dieselben Ergebnisse wie im vorhergehenden Kapitel finden.

Legt man an Stelle des SCHRÖDINGER-Feldes irgendein anderes Feld zugrunde, so gelangt man ganz allgemein zur Quantenfeldtheorie. Zum Beispiel liefert die Quantisierung des MAXWELL-Feldes, gekoppelt mit dem DIRAC-Feld für relativistische Materie, die Quantenelektrodynamik. Da wir uns in diesem Buch nicht mit den Problemen und Schwierigkeiten der relativistischen Theorien auseinandersetzen wollen, beschränken wir uns hier auf die Quantisierung des nichtrelativistischen SCHRÖDINGER-Feldes. Wir können dabei die wesentlichen Züge der Feldquantisierung bereits erkennen.

§ 1. Die Feldoperatoren

Bei der Quantisierung eines Feldes werden die Komponenten der Feldstärken zu Operatoren. Sind die klassischen Felder reell, so sind ihnen HERMITEsche Operatoren zuzuordnen, also z. B. beim elektromagnetischen Feld

$$\mathfrak{E} \rightarrow \vec{\mathscr{E}} = \vec{\mathscr{E}}^{\dagger}, \quad \mathfrak{B} \rightarrow \vec{\mathscr{B}} = \vec{\mathscr{B}}^{\dagger}. \tag{1}$$

[1]) Sofern der Leser das Kap. 1.7 bisher überschlagen hat, sollte er sich jetzt mit den dortigen Überlegungen vertraut machen.

[2]) Dieses Vorgehen nennt man in nicht sehr glücklicher Weise auch „zweite Quantisierung"; man verkennt dabei, daß das SCHRÖDINGERsche Materiefeld ein klassisches Feld ist, das vor der Quantisierung mit der Quantentheorie nichts zu tun hat.

Ist hingegen wie beim SCHRÖDINGERschen Materiefeld die Feldgröße ψ nicht reell, sondern komplex — und daher nicht direkt observabel —, so wird der zugehörige quantentheoretische Feldoperator,

$$\psi \to \Psi, \tag{2}$$

nicht HERMITEsch. Zerlegt man die Feldgröße ψ in Real- und Imaginärteil, $\psi = \psi_1 + \mathrm{i}\psi_2$, so sind ψ_1 und ψ_2 reell und quantentheoretisch durch HERMITEsche Operatoren $\Psi_1 = \Psi_1^\dagger$ und $\Psi_2 = \Psi_2^\dagger$ zu beschreiben. Daher entspricht der konjugiert-komplexen Feldgröße ψ^* der adjungierte Operator $\Psi^\dagger$,

$$\psi^* \to \Psi^\dagger\,. \tag{3}$$

Der Feldoperator Ψ ist ebenso wie in der klassischen Feldtheorie eine Funktion des Ortes $\mathfrak{r}$ und der Zeit t,

$$\Psi = \Psi(\mathfrak{r}, t)\,. \tag{4}$$

$\mathfrak{r}$ und t geben an, in welchem Aufpunkt und zu welcher Zeit das Feld gemeint ist. Es handelt sich also bei $\mathfrak{r}$ und t nicht um Observable des Systems, sondern um Parameter, die verschiedene Feldoperatoren Ψ kennzeichnen; sie bleiben daher c-Zahlen ($\mathfrak{r}$ hat nichts mit dem Ort eines Teilchens zu tun!).

Die Entwicklung (1.5-75) des Feldes nach einem vollständigen Satz orthonormierter Funktionen $v_k(\mathfrak{r})$ ist auch in den Feldoperatoren möglich,

$$\boxed{\Psi(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k c_k(t)\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k}\,. \tag{5}$$

Die Entwicklungskoeffizienten werden jetzt Operatoren c_k. *Sie erfassen die Stärke der Partialwellen $v_k(\mathfrak{r})$ quantentheoretisch.* Wegen der Orthonormierung der Funktionen $v_k(\mathfrak{r})$ (keine Operatoren!) läßt sich Gl. (5) in der Form

$$c_k(t) = \int \Psi(\mathfrak{r}, t)\, v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x \tag{6}$$

auflösen.

Für den adjungierten Feldoperator $\Psi^\dagger$ folgt aus Gl. (5) die Entwicklung

$$\Psi^\dagger(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k c_k^\dagger(t)\, v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}k \tag{5†}$$

und damit die Auflösung

$$c_k^\dagger(t) = \int \Psi^\dagger(\mathfrak{r}, t)\, v_k(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x\,. \tag{6†}$$

Wie wir in 1.7 § 5 gesehen haben, ist $\pi = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\psi^*$ die zu ψ kanonisch konjugierte Feldgröße. Die Operatoren Ψ und $\Psi^\dagger$ sind also sicher nicht miteinander vertauschbar (vgl. § 3).

§ 2. Die Observablen des Schrödingerschen Materiefeldes als Operatoren

a) Der Hamilton-Operator

Den integralen HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ (= Operator der Gesamtenergie) des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes gewinnen wir, indem wir in Gl. (1.7–84) von den Feldgrößen ψ und ψ^* zu den Feldoperatoren ψ und $\psi^\dagger$ übergehen,

$$\boxed{\begin{aligned}\mathscr{H}[\psi^\dagger, \psi] &= \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{grad} \psi^\dagger \operatorname{grad} \psi + V(\mathfrak{r})\, \psi^\dagger \psi\right) \mathrm{d}^3x \\ &= \int \psi^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r})\right) \psi \, \mathrm{d}^3x\end{aligned}} \quad . \tag{7}$$

Dieser HERMITEsche Operator $\mathscr{H}$ ist ein Funktional der Feldoperatoren $\psi^\dagger$ und ψ. Zu der in ihm gewählten Reihenfolge der Operatoren $\psi^\dagger$ und ψ vgl. Fußnote [2]), S. 359.

Setzt man die Entwicklung (5) und (5†) nach einem Funktionensystem $v_k(\mathfrak{r})$ in (7) ein, so erhält man analog zur klassischen Rechnung (1.7–86),

$$\boxed{\mathscr{H}[c^\dagger, c] = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{kk'} c_k^\dagger \, \varepsilon_{kk'} \, c_{k'} \, \mathrm{d}k \, \mathrm{d}k'} \quad , \tag{8}$$

wobei die Größen $\varepsilon_{kk'}$ (c-Zahlen!) gegeben sind durch die Integrale (1.5–79)

$$\varepsilon_{kk'} = \int v_k^*(\mathfrak{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathfrak{r})\right] v_{k'}(\mathfrak{r}) \, \mathrm{d}^3x . \tag{9}$$

Wählt man insbesondere für $v_k(\mathfrak{r})$ Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ der zeitunabhängigen SCHRÖDINGERschen Feldgleichung (1.5–69) zum Eigenwert E_a, so wird $\varepsilon_{aa'} = E_a \, \delta(a, a')$, und Gl. (8) nimmt die einfachere Gestalt

$$\mathscr{H} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{a} E_a \, c_a^\dagger \, c_a \, \mathrm{d}a \tag{10}$$

an.

b) Die Operatoren von Impuls und Schwerpunkt des Feldes

Die Observablen Gesamtimpuls und Schwerpunkt des SCHRÖDINGER-Feldes [Gl. (1.4–28) u. (1.4–22)] werden in der Quantentheorie durch die HERMITEschen Operatoren

$$\boxed{\vec{\mathscr{P}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int \psi^\dagger \operatorname{grad} \psi \, \mathrm{d}^3x \quad \text{und} \quad \vec{\mathscr{X}} = \frac{\int \psi^\dagger \, \mathfrak{r} \, \psi \, \mathrm{d}^3x}{\int \psi^\dagger \psi \, \mathrm{d}^3x}} \;{}^{1)} \tag{11}$$

beschrieben. Die Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren $\psi^\dagger$ und ψ müssen auf alle Fälle die Eigenschaft haben, daß sie die bekannten Vertauschungsrelationen zwischen Ort und Impuls gewährleisten, also

$$[\mathscr{P}_i, \mathscr{X}_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \, \delta_{ik} \, \mathbb{1} \tag{12}$$

(vgl. Aufg. 116).

---

[1]) Zähler und Nenner sind miteinander vertauschbar.

In der Entwicklung nach einem Funktionensystem $v_k(\mathfrak{r})$ nimmt Gl. (11) die Gestalt [vgl. Gl. (1.5–85)]

$$\vec{\mathscr{P}} = \sum_{k,k'}\!\!\!\!\!\!\int c_k^\dagger\, \mathfrak{p}_{kk'}\, c_{k'}\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k' \quad \text{und} \quad \vec{\mathscr{X}} = \frac{\sum\!\!\!\!\!\!\int_{kk'} c_k^\dagger\, \mathfrak{r}_{kk'}\, c_{k'}\, \mathrm{d}k\, \mathrm{d}k'}{\sum\!\!\!\!\!\!\int_{k} c_k^\dagger\, c_k\, \mathrm{d}k} \tag{13}$$

an, wobei

$$\mathfrak{p}_{kk'} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathrm{grad}\, v_{k'}(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x \quad \text{und} \quad \mathfrak{r}_{kk'} = \int v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathfrak{r}\, v_{k'}(\mathfrak{r})\, \mathrm{d}^3x \tag{14}$$

gesetzt wurde [Gl. (1.5–86)].

§ 3. Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren

a) Feldquantisierung mittels Kommutatoren (Bose-Feld)

Entsprechend den korrespondenzmäßigen Überlegungen zur Quantisierung (3.2 § 4) ist es naheliegend, die POISSON-Klammern Gl. (1.7–96) für die kanonisch konjugierten Feldgrößen in Kommutatorrelationen zu übersetzen,

$$\boxed{\begin{aligned} [\psi(\mathfrak{r}, t), \psi(\mathfrak{r}', t)] &= \mathcal{O} \\ [\psi^\dagger(\mathfrak{r}, t), \psi^\dagger(\mathfrak{r}', t)] &= \mathcal{O} \\ [\psi(\mathfrak{r}, t), \psi^\dagger(\mathfrak{r}', t)] &= \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}')\, \mathbb{1} \end{aligned}}\,. \tag{15}$$

Wir werden sehen, daß wir durch diese Quantisierung gerade BOSE-Teilchen erzwingen.

Multiplizieren wir die erste dieser Vertauschungsrelationen mit $v_k^*(\mathfrak{r})\, v_{k'}^*(\mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x'$, so liefert die Ortsintegration die Vertauschungsrelation der Operatoren c_k. *Diese Operatoren, die speziell den „Minus-Vertauschungsrelationen" des* BOSE-*Feldes genügen, bezeichnen wir mit* b_k. Verfahren wir mit den beiden anderen Vertauschungsrelationen (15) entsprechend, so erhalten wir insgesamt

$$\boxed{\begin{aligned} [b_k(t), b_{k'}(t)] &= \mathcal{O} \\ [b_k^\dagger(t), b_{k'}^\dagger(t)] &= \mathcal{O} \\ [b_k(t), b_{k'}^\dagger(t)] &= \delta(k, k')\, \mathbb{1} \end{aligned}}\,. \tag{16}$$

Bei diskretem k steht also in der letzten Zeile das KRONECKER-Symbol.

b) Feldquantisierung mittels Antikommutatoren (Fermi-Feld)

Damit ein quantisiertes Feld nicht BOSE-, sondern FERMI-Teilchen darstellt, muß man die Vertauschungsrelationen so abändern, daß in ihnen dem PAULI-Prinzip Rechnung getragen wird. Wir haben bereits in Kap. 4.5 gesehen, daß dies durch *Antikommutatorrelationen* erreicht wird. Der Antikommutator

zweier Operatoren war durch

$$[\mathcal{F}, \mathcal{G}]_+ = \mathcal{F}\,\mathcal{G} + \mathcal{G}\,\mathcal{F} \tag{17}$$

definiert.

Die Feldoperatoren sollen daher in diesem Fall die Relationen

$$\boxed{\begin{aligned} [\psi_i(\mathfrak{r}, t), \psi_{i'}(\mathfrak{r}', t)]_+ &= \mathcal{O} \\ [\psi_i^\dagger(\mathfrak{r}, t), \psi_{i'}^\dagger(\mathfrak{r}', t)]_+ &= \mathcal{O} \\ [\psi_i(\mathfrak{r}, t), \psi_{i'}^\dagger(\mathfrak{r}', t)]_+ &= \delta_{ii'}\,\delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}')\,\mathbf{1} \end{aligned}} \tag{18}$$

erfüllen. Diese Forderung an die Feldoperatoren bedeutet ein wesentlich stärkeres Abweichen von der klassischen Feldtheorie als die Minus-Klammer-Quantisierung, die ganz im Rahmen der korrespondenzmäßigen Quantisierungsvorschrift lag. Das PAULI-Prinzip ist eben eine Eigenschaft, die klassisch nicht verständlich ist.

Da Fermionen immer halbzahligen Spin haben [Gl. (4.5–7)], hat es keinen Sinn für ein einkomponentiges SCHRÖDINGER-Feld $\psi(\mathfrak{r}, t)$, das keinen Spin besitzt, die Antikommutatorrelationen (18) zu fordern. Eine Beschreibung von Teilchen mit Spin, z. B. Elektronen, kann man aber durch ein zweikomponentiges Feld $\psi_i\,(i = 1, 2)$ erreichen, in dem i die beiden Einstellmöglichkeiten des Spins beschreibt. Bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung und ohne äußeres Magnetfeld[1]) genügt dabei jede Komponente ψ_i der SCHRÖDINGERschen Materiefeldgleichung (27). Zur Vereinfachung der Schreibweise lassen wir daher z. T. den Index i wieder weg.

Die erste der Gln. (18)

$$\psi_i(\mathfrak{r}, t)\,\psi_{i'}(\mathfrak{r}', t) = -\,\psi_{i'}(\mathfrak{r}', t)\,\psi_i(\mathfrak{r}, t) \tag{19}$$

ist der quantenfeldtheoretische Ausdruck für das PAULIsche Antimetrieprinzip. Eine Folge davon ist, daß die Feldoperatoren an verschiedenen Orten nicht kommutieren

$$[\psi_i(\mathfrak{r}, t), \psi_{i'}(\mathfrak{r}', t)]_- \neq \mathcal{O}, \tag{20}$$

d. h., *man kann ein* FERMI-*Feld — im Gegensatz zum elektromagnetischen Feld — prinzipiell nicht ausmessen.* Würde man nämlich das Feld in einem Raum-Zeit-Punkt bestimmen, so verliert durch eine weitere Messung des Feldes an einem anderen Ort die erste Messung ihre Bedeutung.

Setzt man $\mathfrak{r} = \mathfrak{r}'$ und $i = i'$, so ergibt sich insbesondere

$$\psi_i^2(\mathfrak{r}, t) = \mathcal{O}. \tag{21}$$

---

[1]) Die nichtrelativistische Berücksichtigung dieser Effekte liefert die sog. PAULI-Gleichung (als Grenzfall der relativistischen DIRAC-Gleichung).

Wie wir wieder sehen werden, bedeutet dies gerade, daß keine zwei Elektronen denselben Ort und den gleichen Spin einnehmen können.

Von den Vertauschungsrelationen (18) der FERMIschen Feldgrößen kann man wieder wie in a) zu jenen der Entwicklungskoeffizienten $c_k(t)$ übergehen. Wir bezeichnen diese, wenn sie sich auf ein FERMI-Feld beziehen mit $a_k(t)$,

$$\boxed{\begin{aligned} [a_k(t), a_{k'}(t)]_+ &= \mathcal{O} \\ [a_k^\dagger(t), a_{k'}^\dagger(t)]_+ &= \mathcal{O} \\ [a_k(t), a_{k'}^\dagger(t)]_+ &= \delta(k, k')\, \mathbb{1} \end{aligned}}\,. \tag{22}$$

Es sind dieselben Vertauschungsrelationen, die wir bereits in Kap. 4.5 — auf andere Weise — kennengelernt haben. *Diese dort als Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eingeführten Größen bedeuten also quantenfeldtheoretisch die Amplituden der Partialwellen $v_k(\mathfrak{r})$.*

c) Eine Folgerung für die integralen Observablen eines Feldes

Wir wollen nun den *Kommutator* zwischen $\psi(\mathfrak{r})$ und irgendeiner Observablen

$$\mathcal{F} = \int \psi^\dagger(\mathfrak{r}')\, F(\mathfrak{r}')\, \psi(\mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3x' \tag{23}$$

berechnen. Von dieser Gestalt sind die in § 2 angegebenen integralen Feldobservablen. $F(\mathfrak{r}')$ stellt irgendeinen Differentialausdruck in $\mathfrak{r}'$ dar, der auf $\psi(\mathfrak{r}')$ wirkt. Mit Hilfe der Beziehung (4.5–68) erhalten wir

$$[\mathcal{F}, \psi(\mathfrak{r})]_- = \int \psi^\dagger(\mathfrak{r}')\, F(\mathfrak{r}')\, [\psi(\mathfrak{r}'), \psi(\mathfrak{r})]_\mp\, \mathrm{d}^3x'$$
$$\pm \int [\psi^\dagger(\mathfrak{r}'), \psi(\mathfrak{r})]_\mp\, F(\mathfrak{r}')\, \psi(\mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3x'\,.$$

Unabhängig davon, ob ψ ein BOSE- *oder* FERMI-*Feld beschreibt,* ergibt sich damit aus den Vertauschungsrelationen (15) oder (18)

$$\boxed{[\mathcal{F}, \psi(\mathfrak{r})]_- = -\, F(\mathfrak{r})\, \psi(\mathfrak{r})}\,. \tag{24}$$

Mit der HERMITEizität von $\mathcal{F}$ folgt hieraus

$$[\mathcal{F}, \psi^\dagger(\mathfrak{r})]_- = F^*(\mathfrak{r})\, \psi^\dagger(\mathfrak{r})\,. \tag{25}$$

Dies hat zur Folge, daß die Vertauschungsrelation $[\mathcal{F}, \mathcal{G}]$ zweier Observabler vom Typ (23) — z. B. zwischen Ort und Impuls [Gl. (12)] — unabhängig davon ist, ob ein BOSE- oder FERMI-Feld vorliegt.

Aufg. 116: Man beweise die Vertauschungsrelation (12) für den Impuls und Schwerpunkt des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes.

§ 4. Die Schrödingersche Materiefeldgleichung in Operatorform

Der Operator $\mathring{\psi}$, der die zeitliche Veränderung des Materiefeldes beschreibt, genügt der allgemeinen Beziehung (3.2–29) [vgl. auch Gl. (1.7–100)]. Er bestimmt sich also sowohl im Bose- als auch im Fermi-Fall aus dem *Kommutator* zwischen $\mathscr{H}$ und ψ,

$$\boxed{\mathring{\psi}(\mathfrak{r}) = \frac{i}{\hbar}\,[\mathscr{H}, \psi(\mathfrak{r})]_{-}}\,. \tag{26}$$

Mit der Form (7) des Hamilton-Operators liefert die Beziehung (24) sofort

$$\boxed{-\frac{\hbar}{i}\,\mathring{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi + V\psi}\,, \tag{27}$$

also gerade die Schrödinger*sche Materiefeldgleichung in Operatorform.*

Berücksichtigt man den Spin, so ist im Hamilton-Operator (7) ψ durch ψ_i zu ersetzen und über die beiden Spinkomponenten $i = 1, 2$ zu summieren. Die Gl. (27) gilt dann für jede Komponente $\psi_i(\mathfrak{r})$ [Die Spin-Bahn-Kopplung (4.3 § 6c) bleibt dabei unberücksichtigt].

Weil die Operatoren der Feldamplituden $\psi_i(\mathfrak{r})$ dieselben Relationen erfüllen wie die in Kap. 4.5 über das Teilchenbild konstruierten Operatoren $\psi_m(\mathfrak{r})$, sind sie *identisch.* Daher stimmen alle aus dem Feldbild gewonnenen Beziehungen mit denen des Kap. 4.5 überein.

Im Heisenberg-Bild [Gl. (3.5–74H)] ist

$$\mathring{\psi}^H(\mathfrak{r}, t) = \frac{\partial \psi^H(\mathfrak{r}, t)}{\partial t}, \tag{28}$$

und die Gl. (27) wird zu einer partiellen Differentialgleichung für die Operatorfunktion $\psi^H(\mathfrak{r}, t)$,

$$-\frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial \psi^H}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\psi^H + V\,\psi^H. \tag{29}$$

Der Feldoperator $\psi^H(\mathfrak{r}, t)$ *im* Heisenberg-*Bild genügt der* Schrödinger*schen Materiefeldgleichung.* Die durch sie beschriebene zeitliche Entwicklung von ψ läßt sich durch die unitäre Transformation (3.5–87)

$$\psi^H(\mathfrak{r}, t) = e^{+\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}^H(t-t_0)}\;\psi^H(\mathfrak{r}, t_0)\; e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}^H(t-t_0)} \tag{30}$$

darstellen.

Im Schrödinger-Bild hingegen ist natürlich ψ^S (als explizit zeitunabhängiger Operator) zeitlich konstant [Gl. (3.5–73S)],

$$\frac{\partial \psi^S}{\partial t} = \mathcal{O}. \tag{31}$$

Die Feldgrößen ψ in benachbarten Raumpunkten sind (vgl. Aufg. 26 u. 116) durch die Operatorbeziehung

$$\operatorname{grad} \psi = -\frac{i}{\hbar} [\vec{\mathscr{P}}, \psi] \tag{32}$$

mit dem Impulsoperator $\vec{\mathscr{P}}$ des Feldes verknüpft. Diese Gleichung bedeutet, daß die Feldoperatoren in verschiedenen Punkten $\mathfrak{r}$ und $\mathfrak{r}_0$ durch die unitäre Transformation

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\mathscr{P}}\cdot(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}_0)} \psi(\mathfrak{r}_0, t)\, e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{\mathscr{P}}\cdot(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}_0)} \tag{33}$$

korreliert sind.[1])

Entwickelt man die Feldoperatoren in Gl. (27) nach einem Funktionensystem $v_k(\mathfrak{r})$, so ergibt die Gl. (5) unter Verwendung von Gl. (9)

$$-\frac{\hbar}{i} \mathring{c}_k = \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_{k'} \varepsilon_{kk'}\, c_{k'}\, dk' . \tag{34}$$

Im HEISENBERG-Bild folgt damit für $c_k^H(t)$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d c_k^H(t)}{dt} = \mathop{\int\!\!\!\!\!\!\sum}_{k'} \varepsilon_{kk'}\, c_{k'}^H(t)\, dk', \tag{35}$$

also die quantentheoretische Formulierung der klassischen Gleichung (1.5–78).

§ 5. Teilchenzahl-Operatoren für Bosonen

a) Definition und Vertauschungsrelationen

Wir haben bereits früher (1.4 § 1) vermutet, daß die „Intensität" N des SCHRÖDINGERschen Materiefeldes mit der Teilchenzahl korreliert sein muß. Durch die Feldquantisierung wird diese Größe ein HERMITEscher Operator

$$\mathscr{N} = \int \psi^\dagger(\mathfrak{r})\, \psi(\mathfrak{r})\, d^3x = \sum_k b_k^\dagger b_k . \tag{36}$$

Zur Vereinfachung der folgenden Überlegungen beschränken wir uns auf *diskrete* k-Werte. Man nennt $\mathscr{N}$ den Operator der Teilchenzahl. Wir werden in der Tat sehen, daß seine Eigenwerte die Anzahl der vorhandenen Teilchen angibt. $\mathscr{N}$ setzt sich additiv aus den Beiträgen $b_k^\dagger b_k$ der einzelnen Partialwellen zusammen. Die Anteile

$$\mathscr{N}_k = b_k^\dagger b_k \tag{37}$$

bezeichnet man als *Besetzungszahl-Operatoren* der durch $v_k(\mathfrak{r})$ definierten Zustände des Feldes. $\mathscr{N}_k$ ist HERMITEsch.

Aus den BOSE-Vertauschungsrelationen (16) folgt

$$b_i \mathscr{N}_k = b_i b_k^\dagger b_k = (b_k^\dagger b_i + \delta_{ik} 1)\, b_k$$

---

[1]) Die verschiedenen Bilder der Quantentheorie beziehen sich allein auf die Zeitfunktionen. Bezüglich der Ortsabhängigkeit der Feldfunktion ist man immer in einem HEISENBERG-Bild.

oder

$$\boxed{[\mathscr{b}_i, \mathscr{N}_k]_- = \delta_{ik}\, \mathscr{b}_k}\,. \tag{38}$$

Der Übergang zur adjungierten Gleichung liefert

$$[\mathscr{b}_i^\dagger, \mathscr{N}_k]_- = -\,\delta_{ik}\, \mathscr{b}_k^\dagger. \tag{38†}$$

Für $i \neq k$ ist also $\mathscr{N}_k$ mit $\mathscr{b}_i$ und $\mathscr{b}_i^\dagger$ vertauschbar. Für $i = k$ erhalten wir genau die beim harmonischen Oszillator abgeleiteten Relationen (4.2–9).

Nach Gl. (38) ist der Amplitudenoperator $\mathscr{b}_k$ mit dem Besetzungszahl-Operator $\mathscr{N}_k$ nicht vertauschbar. Setzt man

$$\mathscr{b}_k = e^{i\Theta_k} \sqrt{\mathscr{N}_k}\,,$$

so stellt Θ_k den Phasenoperator der k-ten Partialwelle dar, und es folgt

$$[e^{i\Theta_k}, \mathscr{N}_k] = e^{i\Theta_k}$$

oder

$$i\,[\sin\Theta_k, \mathscr{N}_k] = \cos\Theta_k\,, \tag{39}$$

d. h., *die Messung einer bestimmten Besetzungszahl ist mit der Festlegung der Phase nicht verträglich und umgekehrt.* Ist z. B. die Phasendifferenz zweier Wellen vorgegeben, so besteht eine Unsicherheit darüber, wie sich die Teilchenzahl auf die beiden Wellen verteilt. Dies ist gerade die Aussage des in 3.1 § 4 besprochenen Doppelspaltversuches.

Die Besetzungszahl-Operatoren $\mathscr{N}_i$ und $\mathscr{N}_k$ sind untereinander vertauschbar,

$$\boxed{[\mathscr{N}_i, \mathscr{N}_k]_- = \mathscr{O}}\,, \tag{40}$$

denn aus den Gleichungen (38) und (38†) folgt

$$\begin{aligned}
\mathscr{N}_i \mathscr{N}_k - \mathscr{N}_k \mathscr{N}_i &= \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_i \mathscr{N}_k - \mathscr{N}_k \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_i \\
&= \mathscr{b}_i^\dagger (\mathscr{N}_k \mathscr{b}_i + \delta_{ik} \mathscr{b}_k) - \mathscr{N}_k \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_i \\
&= \mathscr{N}_k \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_i - \delta_{ik} (\mathscr{b}_k^\dagger \mathscr{b}_i - \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_k) - \mathscr{N}_k \mathscr{b}_i^\dagger \mathscr{b}_i \\
&= \mathscr{O}.
\end{aligned}$$

b) Die Eigenwerte der Besetzungszahl-Operatoren

Weil die verschiedenen Besetzungszahl-Operatoren miteinander vertauschbar sind, besitzen sie einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren,

$$\mathscr{N}_k\, |u_{N_1 N_2 \ldots N_k \ldots}\rangle = N_k\, |u_{N_1 N_2 \ldots N_k \ldots}\rangle\,. \tag{41}$$

Um eine Aussage über die möglichen Eigenwerte N_k zu gewinnen, wählen wir einen festen Index k. Da nach Gl. (38) und (38†) die Vertauschungsrelationen von $\mathscr{N}_k$ mit $\mathscr{b}_k$ und $\mathscr{b}_k^\dagger$ mit jenen des harmonischen Oszillators völlig übereinstimmen, können wir ohne weitere Rechnung die dort gewonnenen Ergebnisse über-

nehmen: *Die Eigenwerte N_k der Besetzungszahl-Operatoren $\mathcal{N}_k$ sind im* BOSE-*Fall positive ganze Zahlen,*

$$\boxed{N_k = 0, 1, 2, \ldots \text{ (Besetzungszahlen)}}\,. \tag{42}$$

Die Eigenwerte des Gesamtteilchenzahl-Operators $\mathcal{N}$ sind die Summe

$$N = \sum_k N_k. \tag{43}$$

Der Gesamtteilchen-Operator $\mathcal{N}$ vertauscht mit dem HAMILTON-Operator (7) (Aufg. 117),

$$\overset{\circ}{\mathcal{N}} = \mathcal{O}. \tag{44}$$

Wenn also der Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ zur Zeit t_0 in einem Eigenraum von $\mathcal{N}$ liegt, so bleibt er in diesem auch zu späteren Zeiten: *Die Gesamtteilchenzahl N ist eine Konstante.* Im SCHRÖDINGER-Feld tritt keine Teilchenerzeugung oder -vernichtung auf[1]), *lediglich die Besetzungszahlen N_k können sich im Laufe der Zeit verändern.*

Entwickelt man das Feld nach Eigenfunktionen der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung $v_k(\mathfrak{r}) \to u_a(\mathfrak{r})$, so hat der HAMILTON-Operator nach Gl. (10) die Gestalt

$$\mathcal{H} = \sum_a E_a \mathcal{N}_a. \tag{45}$$

Mit der Diagonalisierung der $\mathcal{N}_a$ erhält man damit auch die Gesamtenergie des Feldes. Die möglichen Eigenwerte E von $\mathcal{H}$,

$$\mathcal{H}\,|u_{N_1\ldots}\rangle = E\,|u_{N_1\ldots}\rangle, \tag{46}$$

lauten dann

$$\boxed{E = \sum_a E_a N_a}\,.\,^{2)} \tag{47}$$

Die Gesamtenergie des Feldes ist eine Summe ganzzahliger Vielfacher von E_a; sie verhält sich so, als ob sie durch N_a Teilchen der Energie E_a aufgebaut wäre (Fig. 85).

---

[1]) Würde der HAMILTON-Operator die Feldoperatoren ψ oder $\psi^\dagger$ linear enthalten, so wäre eine Änderung der Gesamtteilchenzahl möglich.

[2]) Hätte man statt Gl. (8) die Reihenfolge

$$\mathcal{H}' = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{kk'} c_{k'}\, \varepsilon_{kk'}\, c_k^\dagger \,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k'$$

gewählt, so hätte Gl. (45) die Gestalt

$$\mathcal{H}' = \sum E_a\, b_a\, b_a^\dagger = \sum E_a (\mathcal{N}_a + 1)$$

angenommen. Bei einem nach unendlich reichenden Energiespektrum divergiert jedoch der Term $\sum E_a$. Mit der getroffenen Reihenfolge der Operatoren in Gl. (7) oder (8) hat man diese unendliche Konstante vermieden.

Die zu den Energieeigenwerten E_a gehörigen Besetzungszahl-Operatoren $\mathcal{N}_a$ sind mit $\mathcal{H}$ vertauschbar, sie sind Erhaltungsgrößen

$$\overset{\circ}{\mathcal{N}}_a = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,[\mathcal{H}, \mathcal{N}_a] = \mathcal{O}. \tag{48}$$

Man ist natürlich keineswegs gezwungen, als v_k gerade Energieeigenfunktionen zu wählen. Betrachtet man *irgendeine integrale Feldobservable* $\mathcal{L}$ der Gestalt

$$\mathcal{L} = \sum_{ll'} \mathscr{b}_l^\dagger\, \lambda_{ll'}\, \mathscr{b}_{l'} \tag{49}$$

— z. B. den Feldimpuls (13) — und entwickelt man das Feld nach solchen Funktionen v_l, die die Matrix $\lambda_{ll'}$ diagonalisieren, $\lambda_{ll'} = \lambda_l\, \delta_{ll'}$, so erhält man

$$\mathcal{L} = \sum_l \lambda_l\, \mathcal{N}_l. \tag{50}$$

Fig. 85. N_a Teilchen der Energie E_a

Der Operator $\mathcal{L}$ ist dann mit allen $\mathcal{N}_l$ vertauschbar,

$$[\mathcal{L}, \mathcal{N}_l] = \mathcal{O}, \text{ [1]} \tag{51}$$

so daß $\mathcal{L}$ und die $\mathcal{N}_l$ einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren besitzen,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\, |\varphi_{N_1\ldots}\rangle &= \Lambda\, |\varphi_{N_1\ldots}\rangle, \\ \mathcal{N}_l\, |\varphi_{N_1\ldots}\rangle &= N_l\, |\varphi_{N_1\ldots}\rangle. \end{aligned} \tag{52}$$

Die Eigenwerte Λ der Observablen $\mathcal{L}$ sind wiederum *eine Summe ganzzahliger Vielfacher der Einteilcheneigenwerte* λ_l,

$$\boxed{\Lambda = \sum \lambda_l\, N_l}\,. \tag{53}$$

Die Quantisierung des Feldes liefert also die experimentell nachweisbaren Teilcheneigenschaften.

c) Die Eigenvektoren der Besetzungszahl-Operatoren. N-Darstellung des $\mathfrak{U}^+$

Aus der Behandlung des harmonischen Oszillators können wir sofort die Wirkung der Operatoren $\mathscr{b}_k$ und $\mathscr{b}_k^\dagger$ auf die Eigenvektoren $|u_{N_1\ldots N_k\ldots}\rangle$ übernehmen: *$\mathscr{b}_k^\dagger$ erzeugt aus $|u_{N_1\ldots N_k\ldots}\rangle$ einen Zustand, in dem die Besetzungszahl N_k um eins erhöht ist.*

$$\boxed{\mathscr{b}_k^\dagger\, |u_{N_1\ldots N_k\ldots}\rangle = \sqrt{N_k + 1}\; |u_{N_1\ldots N_k+1\ldots}\rangle \quad \text{(Erzeugungsoperator)}}\,, \tag{54}$$

[1]) Mit $\mathcal{H}$ brauchen diese Besetzungszahl-Operatoren dann natürlich nicht zu vertauschen, d. h. $\overset{\circ}{\mathcal{N}}_l \neq \mathcal{O}$.

ℓ_k *hingegen verringert die Besetzungszahl* N_k *um eins,*

$$\boxed{\ell_k \, | u_{N_1 \dots N_k \dots} \rangle = \sqrt{N_k} \, | u_{N_1 \dots N_k - 1 \dots} \rangle \quad \text{(Vernichtungsoperator)}} \, . \tag{55}$$

Mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren kann man einen beliebigen Vektor $|u_{N_1 \dots N_k \dots}\rangle$ aus dem *Vakuum*

$$|0\rangle = |u_{00 \dots 0 \dots}\rangle , \tag{56}$$

in dem kein Teilchen vorhanden ist ($\ell_k \, |0\rangle = 0$), aufbauen,

$$\boxed{|u_{N_1 \dots N_k \dots}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! \dots N_k! \dots}} \, (\ell_1^\dagger)^{N_1} \dots (\ell_k^\dagger)^{N_k} \dots |0\rangle} \, . \tag{57}$$

Numerieren wir die Zustände $|u\rangle$ nicht durch die Besetzungszahlen $N_1, \dots, N_k, \dots$ sondern durch die Quantenzahlen $k, l, \dots$, so hat man

$$\left.\begin{array}{ll} N = 0 & |0\rangle , \\ N = 1 & |u_k\rangle = \ell_k^\dagger \, |0\rangle , \\ N = 2 & \begin{cases} |u_{kl}^+\rangle = \ell_k^\dagger \, \ell_l^\dagger \, |0\rangle = |u_{lk}^+\rangle & (k \neq l) , \\ |u_{kk}^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \, (\ell_k^\dagger)^2 |\, 0\rangle , \end{cases} \\ \vdots & \vdots \qquad\qquad . \end{array}\right\} \tag{58}$$

Wegen der Vertauschbarkeit der Operatoren $\ell_k^\dagger$ sind die Zustände $|u_{kl\dots}^+\rangle$ *symmetrisch* in den Quantenzahlen. Eine Numerierung der Teilchen kommt überhaupt nicht ins Spiel, weil von vornherein stets nur von der Anzahl der Teilchen die Rede ist.

Alle Linearkombinationen von Zuständen (57) oder (58) bilden die Gesamtheit aller symmetrischen Zustände. Sie spannen den symmetrischen unitären Raum $\mathfrak{U}^+$ der Bosonen auf, den wir bereits auf andere Weise in Kap. 4.5 kennengelernt haben. Wählt man einen festen Eigenwert N von $\mathcal{N}$, so hat man einen Unterraum $\mathfrak{U}_N^+$ vor sich, in dem ein System mit fester Teilchenzahl beschrieben wird.

Wir wollen uns den *Zusammenhang mit der Quantentheorie des Teilchenbildes* explizit an Spezialfällen vergegenwärtigen. Dazu betrachten wir zunächst den Unterraum *eines* Teilchens, $N = 1$. Dann ist

$$|u_k\rangle = \ell_k^\dagger \, |0\rangle \tag{59}$$

ein Einteilchenzustand. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für diesen Zustand kann man daher auch schreiben

$$\boxed{\Phi(k) = \langle u_k \,|\, \Phi\rangle = \langle 0 \,|\, \ell_k \Phi\rangle} \tag{60}$$

(k-Darstellung). Identifizieren wir b_k insbesondere mit dem Feldoperator $\psi(\mathfrak{r})$, so wird aus Gl. (59)

$$|u_{\mathfrak{r}}\rangle = \psi^{\dagger}(\mathfrak{r})\,|0\rangle, \tag{61}$$

der Ortseigenvektor eines Teilchens. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude für eine Ortsmessung lautet daher [vgl. Gl. (4.5–94)]

$$\boxed{\Phi(\mathfrak{r}) = \langle 0\,|\,\psi(\mathfrak{r})\,\Phi\rangle}\,. \tag{62}$$

Weil im HEISENBERG-Bild $\psi^{H}(\mathfrak{r}, t)$ die SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung in Operatorform (29) erfüllt und $|\Phi^{H}\rangle$ konstant ist, erhalten wir für die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ wieder die uns aus der Quantentheorie des *Ein*teilchenbildes bereits bekannte Gleichung

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\partial\Phi(\mathfrak{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta\Phi + V\Phi \tag{63}$$

(SCHRÖDINGER-Gleichung der Wahrscheinlichkeitsamplitude).

Die *Matrixelemente* von $\mathscr{H}$ (Gl. 8) im Unterraum eines Teilchens lauten

$$\langle u_{l_1}\,|\,\mathscr{H}\,u_{l_2}\rangle = \sum_{k,k'} \langle 0\,|\,b_{l_1}\,b_k^{\dagger}\,\varepsilon_{kk'}\,b_{k'}\,b_{l_2}^{\dagger}\,|0\rangle\,. \tag{64}$$

Aus den Vertauschungsrelationen folgt

$$b_{k'}\,b_{l_2}^{\dagger}\,|0\rangle = (\delta_{k'l_2} + b_{l_2}^{\dagger}\,b_{k'})\,|0\rangle = \delta_{k'l_2}\,|0\rangle \tag{65}$$

und entsprechend

$$\langle 0|\,b_{l_1}\,b_k^{\dagger} = \delta_{kl_1}\,\langle 0\,|, \tag{65'}$$

so daß man für Gl. (64) erhält

$$\langle u_{l_1}\,|\,\mathscr{H}\,u_{l_2}\rangle = \sum_{k,k'} \delta_{kl_1}\,\varepsilon_{kk'}\,\delta_{k'l_2} = \varepsilon_{l_1l_2}, \tag{66}$$

d. h., die Matrixelemente des HAMILTON-Operators (8) des Materiefeldes sind im Unterraum $\mathfrak{U}_1$ mit den Matrixelementen des HAMILTON-Operators *eines* Teilchens identisch.

Auch mit dem Fall $N = 2$ wollen wir uns zur Vertiefung des Verständnisses noch etwas befassen. Wir fragen uns nach den Matrixelementen des HAMILTON-Operators (8) des SCHRÖDINGER-Feldes im Teilraum $\mathfrak{U}_2^{+}$, z. B.

$$\langle u_{l_1l_2}^{+}\,|\,\mathscr{H}\,u_{l_3l_4}^{+}\rangle = \sum_{kk'} \langle 0|\,b_{l_1}\,b_{l_2}\,b_k^{\dagger}\,\varepsilon_{kk'}\,b_{k'}\,b_{l_3}^{\dagger}\,b_{l_4}^{\dagger}\,|0\rangle\,. \tag{67}$$

Aus den Vertauschungsrelationen der b folgt

$$\begin{aligned} b_{k'}\,b_{l_3}^{\dagger}\,b_{l_4}^{\dagger}\,|0\rangle &= (\delta_{k'l_3}\,1 + b_{l_3}^{\dagger}\,b_{k'})\,b_{l_4}^{\dagger}\,|0\rangle \\ &= \delta_{k'l_3}\,b_{l_4}^{\dagger}\,|0\rangle + b_{l_3}^{\dagger}\,\delta_{k'l_4}\,|0\rangle \\ &= \delta_{k'l_3}\,|u_{l_4}\rangle + \delta_{k'l_4}\,|u_{l_3}\rangle \end{aligned} \tag{68}$$

und entsprechend

$$\langle 0 | b_{l_1} b_{l_2} b_k^\dagger = \delta_{kl_1} \langle u_{l_2} | + \delta_{kl_2} \langle u_{l_1} | . \tag{68'}$$

In Gl. (67) eingesetzt, erhalten wir damit nach Ausführung der Summation

$$\langle u_{l_1 l_2}^+ | \mathscr{H} \, u_{l_3 l_4}^+ \rangle = \varepsilon_{l_1 l_3} \delta_{l_2 l_4} + \varepsilon_{l_1 l_4} \delta_{l_2 l_3} + \varepsilon_{l_2 l_3} \delta_{l_1 l_4} + \varepsilon_{l_2 l_4} \delta_{l_1 l_3} .$$

Dasselbe Ergebnis ergibt sich, wenn man von einem Zweiteilchen-HAMILTON-Operator $h \times 1 + 1 \times h$ ausgeht und seine Matrixelemente

$$\frac{1}{2} \langle u_{l_1} u_{l_2} + u_{l_2} u_{l_1} | h \times 1 + 1 \times h | u_{l_3} u_{l_4} + u_{l_4} u_{l_3} \rangle \tag{69}$$

im $\mathfrak{U}_2^+$ berechnet. Allgemein verhält sich der HAMILTON-Operator (8) des Materiefeldes in einem Teilraum $\mathfrak{U}_N^+$ ebenso wie eine Summe von N Einteilchen-HAMILTON-Operatoren im gleichen Raum. Für Fermionen haben wir den entsprechenden Sachverhalt bereits in Kap. 4.5 kennengelernt.

Aufg. 117: Man zeige, daß $\mathscr{N}$ mit dem HAMILTON-Operator (7) des SCHRÖDINGER-Feldes vertauscht.

§ 6. Teilchenzahl-Operatoren für Fermionen

a) Ihre Eigenwerte

Die Besetzungszahl-Operatoren

$$\mathscr{N}_k = a_k^\dagger a_k \tag{70}$$

für Fermionen haben besonders einfache Eigenschaften, weil nach Gl. (22)

$$a_k^2 = 0, \quad a_k^{\dagger 2} = 0 \tag{71}$$

und

$$a_k a_k^\dagger + a_k^\dagger a_k = 1 \tag{72}$$

gilt. Ersetzen wir in dem Quadrat von $\mathscr{N}_k$,

$$\mathscr{N}_k^2 = a_k^\dagger a_k a_k^\dagger a_k ,$$

die beiden mittleren Glieder durch $(1 - a_k^\dagger a_k)$, so ergibt sich wegen Gl. (71) $a_k^\dagger a_k$, d. h., für die Besetzungszahl-Operatoren von Fermionen gilt

$$\boxed{\mathscr{N}_k^2 = \mathscr{N}_k} . \tag{73}$$

Außerdem kann man für verschiedene Indizes aus den Vertauschungsrelationen (22) wiederum leicht die Vertauschbarkeit der $\mathscr{N}_k$ untereinander beweisen,

$$[\mathscr{N}_i, \mathscr{N}_k] = 0 . \tag{74}$$

Die Besetzungszahl-Operatoren besitzen somit einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren

$$\mathscr{N}_k | u_{N_1 \ldots N_k \ldots} \rangle = N_k | u_{N_1 \ldots N_k \ldots} \rangle . \tag{75}$$

Wenden wir hierauf die Beziehung (73) an, so folgt unmittelbar, daß auch für die Eigenwerte

$$N_k^2 = N_k$$

gilt. Diese Gleichung hat die Lösungen 0 und 1,

$$\boxed{N_k = 0, 1 \;\; \text{für Fermionen}}\,. \tag{76}$$

In einem Zustand k kann sich höchstens *ein* Teilchen befinden. Damit ist aus der Vertauschungsrelation (18) bzw. (22) in der Tat wieder das PAULIsche Prinzip hergeleitet.

b) Die Fermionen-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren. N-Darstellung des $\mathfrak{U}$

Die Eigenwertgleichung (75) hat nach Gl. (76) die beiden Formen

$$a_k^\dagger\, a_k \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = 0\,, \tag{77}$$

$$a_k^\dagger\, a_k \,|u_{\ldots 1_k \ldots}\rangle = |u_{\ldots 1_k \ldots}\rangle\,. \tag{78}$$

Um die Wirkung der Operatoren a_k und $a_k^\dagger$ auf diese Eigenvektoren kennenzulernen, verfahren wir folgendermaßen:

α) Wir wenden auf Gl. (77) a_k an und erhalten nach Benutzung von Gl. (72)

$$(1 - a_k^\dagger\, a_k)\, a_k \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = 0\,.$$

Wegen Gl. (71) verschwindet aber der zweite Term, und es ergibt sich

$$\boxed{a_k \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = 0}\,. \tag{79}$$

Befindet sich kein Teilchen im Zustand k, so liefert also die Anwendung von a_k Null.

β) Multipliziert man Gl. (78) mit $a_k^\dagger$, so verschwindet nach Gl. (71) die linke Seite, und man erhält

$$\boxed{a_k^\dagger \,|u_{\ldots 1_k \ldots}\rangle = 0}\,. \tag{80}$$

Diese Gleichung verhindert also — im Gegensatz zu den Erzeugungsoperatoren von Bosonen —, daß der Eigenwert 1 überschritten wird.

γ) Die Beziehung

$$a_k^\dagger\, a_k\, a_k^\dagger \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = (1 - a_k\, a_k^\dagger)\, a_k^\dagger \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = a_k^\dagger \,|u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle$$

kann man auch in der Form

$$\mathcal{N}_k \,|a_k^\dagger\, u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle = |a_k^\dagger\, u_{\ldots 0_k \ldots}\rangle$$

schreiben, d. h., $|a_k^\dagger u_{\dots 0_k \dots}\rangle$ ist Eigenvektor von $\mathcal{N}_k$ zum Eigenwert 1. Es gilt also

$$\boxed{a_k^\dagger |u_{\dots 0_k \dots}\rangle = |u_{\dots 1_k \dots}\rangle \text{ (Erzeugungsoperator)}}\,; \tag{81}$$

der Operator $a_k^\dagger$ erzeugt ein Fermion im Zustand k.

δ) Die Gl. (77) schreiben wir in der Form

$$(1 - a_k a_k^\dagger)\,|u_{\dots 0_k \dots}\rangle = 0,$$

d. h. aber nach Gl. (81)

$$\boxed{a_k |u_{\dots 1_k \dots}\rangle = |u_{\dots 0_k \dots}\rangle \text{ (Vernichtungsoperator)}}\,; \tag{82}$$

durch a_k wird ein Fermion im Zustand k vernichtet.

Ein beliebiger Eigenvektor (75) läßt sich aus dem *Vakuum* $|0\rangle$ durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren $a_k^\dagger$ aufbauen. Kennzeichnen wir die Zustände $|u\rangle$ wiederum nicht durch die Besetzungszahlen $N_1, \dots,$ sondern durch die Quantenzahlen $k, l, \dots$ usw., so erhalten wir

$$\left.\begin{array}{ll} N = 0 & |0\rangle \\ N = 1 & |u_k\rangle = a_k^\dagger\,|0\rangle, \\ N = 2 & |u_{\overline{kl}}\rangle = a_k^\dagger\, a_l^\dagger\,|0\rangle = -\,|u_{\overline{lk}}\rangle, \\ \vdots & \vdots \end{array}\right\} \tag{83}$$

Wegen $a_k^\dagger a_l^\dagger = -a_l^\dagger a_k^\dagger$ sind diese Zustände in den Quantenzahlen *antimetrisch*. Gleiche Quantenzahlen können nicht auftreten. Alle Linearkombinationen der Vektoren (83) bilden den antimetrischen Raum $\mathfrak{U}^-$ der Fermionen. —

Insgesamt haben wir durch die quantisierte Feldtheorie genau dieselben Ergebnisse gewonnen, die wir bereits in Kap. 4.5 aus der Teilchentheorie hergeleitet haben. *Damit ist die Äquivalenz der Quantentheorie des Teilchenbildes mit jener des Feldbildes explizit nachgewiesen.*

§ 7. Die elektrostatische Selbstwechselwirkung eines quantisierten Materiefeldes

Berücksichtigt man im SCHRÖDINGERschen Materiefeld die COULOMBsche Wechselwirkung, so lautet nach Gl. (1.7-91) sein HAMILTON-Operator

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int \psi^\dagger(\mathfrak{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right) \psi(\mathfrak{r})\, d^3x \\ &+ \frac{1}{2} \int\int \psi^\dagger(\mathfrak{r})\, \psi^\dagger(\mathfrak{r}')\, \frac{q^2}{|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}\, \psi(\mathfrak{r}')\, \psi(\mathfrak{r})\, d^3x\, d^3x' \\ &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_W. \end{aligned} \tag{84}$$

Für den Beitrag der Wechselwirkung $\mathscr{H}_W$ kann man in der Entwicklung nach irgendeinem Funktionensystem auch schreiben

$$\mathscr{H}_W = \frac{1}{2} \underset{k_1 \ldots k_4}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} c_{k_1}^\dagger \, c_{k_2}^\dagger \, \varepsilon_{k_1 k_2; k_3 k_4} \, c_{k_4} \, c_{k_3} \, \mathrm{d}k_1 \ldots \mathrm{d}k_4 . \tag{85}$$

Dabei ist ε durch Gl. (1.6–5) gegeben. Denselben Ausdruck für $\mathscr{H}_W$ haben wir bereits in 4.5 § 6e kennengelernt.

Zunächst betrachten wir die Matrixelemente von $\mathscr{H}_W$ im Unterraum *eines* Teilchens,

$$\langle u_{l_1} \,|\, \mathscr{H}_W \, u_{l_2} \rangle = \langle 0 \,|\, c_{l_1} \, \mathscr{H}_W \, c_{l_2}^\dagger \,|\, 0 \rangle . \tag{86}$$

Da sowohl für Bosonen [vgl. Gl. (65)] als auch für Fermionen die Vektoren

$$c_{k_4} \, c_{k_3} \, c_{l_2}^\dagger \,|\, 0 \rangle = 0$$

verschwinden, sind alle Matrixelemente (86) der Coulombschen Wechselwirkung im Unterraum $\mathfrak{U}_1$ Null. *Die Quantisierung des Materiefeldes eliminiert also die elektrostatische Wechselwirkung der „Materiewolke eines Elektrons" von selbst.* Damit ist auch dieser in der klassischen Betrachtungsweise (1.6 §1) unverständliche Sachverhalt quantentheoretisch erklärt.

Im Unterraum von zwei Teilchen $\mathfrak{U}_2^\pm$ hingegen verschwinden die Matrixelemente der elektrostatischen Wechselwirkung

$$\langle u_{l_1 l_2}^\pm \,|\, \mathscr{H}_W \, u_{l_3 l_4}^\pm \rangle$$

nicht. Ihre Berechnung (Aufg. 118) zeigt, daß sie mit den Matrixelementen der Coulombschen Wechselwirkung zweier Teilchen

$$\left\langle u_{l_1 l_2}^\pm \,\middle|\, \frac{q^2}{|\vec{x}^1 - \vec{x}^2|} \, u_{l_3 l_4}^\pm \right\rangle$$

übereinstimmt.

Aufg. 118: Man beweise den eben angegebenen Sachverhalt.

Siebentes Kapitel

Quantentheorie der Streuprozesse

§ 1. Die Dynamik des Streuprozesses

a) Formulierung des Problems

Auf die Frage nach den zwischen den Elementarteilchen wirksamen Kräften geben Stoßexperimente zwischen den Partikeln reiche Information. Aus der Fülle der damit verknüpften Probleme, die z. B. auch die Kernreaktion umfassen, wollen wir das einfachste herausgreifen: Die Streuung eines (nichtrela-

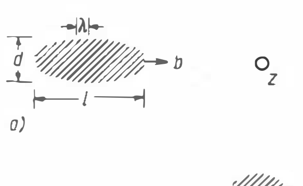
tivistischen) Teilchens an einem vorgegebenen Potential $V(\mathfrak{r})$. Wir betrachten also nur die Dynamik *eines* Teilchens, das andere Teilchen soll so schwer sein, daß seine Bewegung nicht berücksichtigt zu werden braucht. Weiter nehmen wir an, daß das Potential in großer Entfernung genügend rasch verschwindet. Wie eine genauere Untersuchung zeigt, ist es für die folgenden Überlegungen notwendig, daß das Potential rascher als $1/r$ verschwindet (in den Ergebnissen kann man das COULOMB-Potential noch als Grenzfall diskutieren).

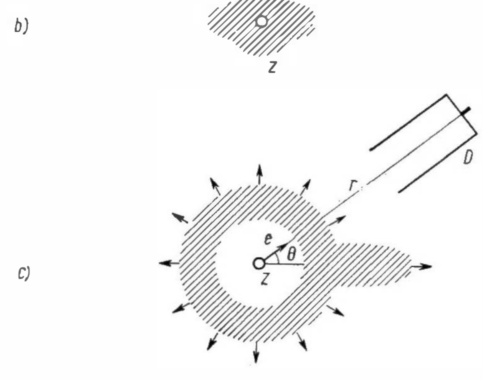
Die Fig. 86 erläutert den prinzipiellen Ablauf eines Streuprozesses. Vor der Streuung bewegt sich das Teilchen in großer Entfernung von dem Streuzentrum kräftefrei (a). Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ ist für große negative Zeiten $t \to -\infty$ ein kräftefreies Wellenpaket. Damit das Teilchen einen einigermaßen gut definierten Impuls hat, muß die Wellenlänge λ wesentlich kleiner sein als die räumlichen Ausdehnungen l, d des Wellenpaketes, $\lambda \ll l, d$.

In dem Zeitintervall, in dem das Wellenpaket über das Streuzentrum hinwegstreicht (b), ist das Potential $\mathscr{V}(\vec{x})$ wirksam. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude Φ verändert sich nach Maßgabe von

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2} + \mathscr{V}(\vec{x}).$$

Für große Zeiten $t \to +\infty$ ist das Teilchen wieder außerhalb des Potentials (c). Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$, die als Folge des Streuvorgangs aus einer durchgehenden Welle und einer nach allen Seiten auslaufenden Streuwelle besteht, verändert sich wieder nach der kräftefreien SCHRÖDINGER-Gleichung. Für Entfernungen r, die der Bedingung $\sqrt{\lambda r/2\pi} \ll l$ genügen, kann man nach Gl. (1.5–39 u. 41) das kräftefreie Zerfließen der Welle vernachlässigen.





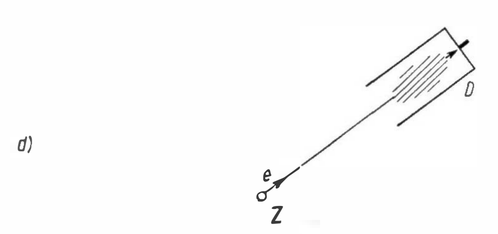


Fig. 86. Zur Dynamik des Streuprozesses: a) Einlaufendes, kräftefreies Wellenpaket; b) Wellenpaket am Streuzentrum Z; c) Auslaufendes, kräftefreies Wellenpaket; d) Reduktion des Wellenpaketes nach Ansprechen des Detektors D

Die Wahrscheinlichkeit, daß in einem seitlich aufgestellten Detektor D das Teilchen nachgewiesen wird, ist durch $\mathrm{d}\Omega \int |\Phi(\mathfrak{r}, t)|^2 r^2 \, \mathrm{d}r$ gegeben. Für $d \ll r \sin\theta$ ist diese Wahrscheinlichkeit allein durch die Streuwelle bestimmt (die nach vorwärts gestreute Welle, $\theta \approx 0$, hingegen kann nicht von der durchgehenden Welle getrennt werden).

Hat der Detektor auf ein Teilchen angesprochen, so findet durch diese Messung eine Zustandsreduktion (Kap. 3.3 u. 3.7) statt, die durchgehende Welle und die Streuwelle verschwinden als Wahrscheinlichkeitsfeld. Es entsteht eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, die durch ein Wellenpaket im Innern des Detektors beschrieben wird (d). Diese Zustandsreduktion liegt jedoch außerhalb der Behandlung des Streuprozesses, sie ist eine Folge der Wechselwirkung des Teilchens mit dem Meßapparat (Detektor).

b) Mathematische Durchführung

Die quantentheoretische Behandlung des Streuvorgangs besteht (im Schrödinger-Bild) darin, daß man die zeitliche Veränderung des Zustandsvektors $|\Phi(t)\rangle$ untersucht. Wie bei jedem dynamischen Problem ist dafür eine Anfangsbedingung vorzugeben, die der physikalischen Situation zu Beginn Rechnung trägt. In unserem Fall lautet diese Anfangsbedingung, daß $|\Phi(t)\rangle$ für $t \to -\infty$ ein kräftefreier Zustand ist (Asymptotenbedingung).

$$\left.\begin{array}{llll} & \text{(a)} & \text{(b)} & \text{(c)} \\ \text{Für} & t \to -\infty & t \text{ endlich} & t \to +\infty \\ \text{verändert sich} & |\Phi(t)\rangle & \underbrace{|\Phi(t)\rangle \qquad\qquad |\Phi(t)\rangle} & \\ & \text{(vorgegeben)} & \text{(gesucht)} & \\ \text{nach} & \mathscr{H}_0 & \mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{V} & \mathscr{H}_0 \end{array}\right] . \tag{1}$$

Zur mathematischen Durchführung dieses Problems gehen wir von Eigenvektoren $|u_a^0\rangle$ des ungestörten Hamilton-Operators $\mathscr{H}_0 = \frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2}$, der kontinuierliche Eigenwerte $E_a \geqq 0$ besitzt, aus,

$$\mathscr{H}_0 \, |u_a^0\rangle = E_a \, |u_a^0\rangle . \tag{2}$$

Die Eigenvektoren bilden ein vollständiges Basissystem, $\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a |u_a^0\rangle \langle u_a^0| \, \mathrm{d}a = \mathbb{1}$; sie sind auf δ-Funktion normiert, $\langle u_a^0 \, | \, u_{a'}^0\rangle = \delta(a, a')$. Der Index a steht repräsentativ für alle die Eigenvektoren numerierenden Quantenzahlen. Wählt man z. B. für $|u_a^0\rangle$ Impulseigenvektoren $|u_{\mathfrak{k}}\rangle$, so ist $a \to k_x, k_y, k_z$ (= kontinuierlich); separiert man die Gl. (2) in räumlichen Polarkoordinaten [Gl. (1.5–23)], so wird $a \to k = \sqrt{2m\,E_a/\hbar^2}$ (= kontinuierlich), l, m (= Drehimpulsquantenzahlen, dis-

kret). Ein beliebiger kräftefreier Zustand lautet in der Entwicklung nach den Vektoren $|u_a^0\rangle$

$$|\Phi^{\text{frei}}(t)\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a c(a)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t}\, |u_a^0\rangle\, da, \tag{3}$$

wobei die Koeffizienten $c(a)$ die spezielle Form des Pakets beschreiben (Normierung: $\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a |c(a)|^2\, da = 1$).

Zwischen irgend zwei Zeiten t und t_0 besteht im SCHRÖDINGER-Bild für den Zustandsvektor $|\Phi\rangle$ der Zusammenhang

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)}\, |\Phi(t_0)\rangle. \tag{4}$$

Der Streuzustand $|\Phi(t)\rangle$, der sich aus dem für $t_0 \to -\infty$ vorgegebenen freien Paket entwickelt, lautet daher

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}t} \lim_{t_0 \to -\infty} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a c(a)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a - \mathscr{H})t_0}\, |u_a^0\rangle\, da. \tag{5}$$

Zur Behandlung dieses Grenzwertes beachten wir, daß für eine Funktion $F(t_0)$, die einen Grenzwert für $t_0 \to -\infty$ besitzt, dieser in der Form

$$\lim_{t_0 \to -\infty} F(t_0) = \lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t'} F(t')\, dt' \quad (\varepsilon > 0) \tag{6}$$

geschrieben werden kann.[1]) Wenden wir diese Beziehung auf Gl. (5) an, so erhalten wir

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}t} \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_a c(a) \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a - \mathscr{H} + i\varepsilon)t'}\, dt'\, |u_a^0\rangle\, da. \tag{7}$$

Die Ausführung des Integrals über t' ergibt die Vektoren

$$|u_a^{(+)}\rangle \equiv \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_a - \mathscr{H} + i\varepsilon)t'}\, dt'\, |u_a^0\rangle = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{i\varepsilon}{E_a - \mathscr{H} + i\varepsilon} |u_a^0\rangle.\ ^{2)} \tag{8}$$

---

[1]) Zur Herleitung dieser Beziehung betrachten wir das Integral

$$\varepsilon \int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t'} F(t')\, dt' = \int_{-\infty}^{0} e^{x} F\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) dx \qquad (\varepsilon t' = x),$$

wobei ε eine positive Zahl bedeutet. Mit $\varepsilon \to 0$ geht auf der rechten Seite $F\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \to F(-\infty)$. Ziehen wir diesen Grenzwert vor das Integral und beachten wir, daß $\int_{-\infty}^{0} e^{x}\, dx = 1$ ist, so folgt Gl. (6).

[2]) Wegen Gl. (10) existiert der Operator $(\mathscr{H} - E_a)^{-1}$ nicht. Man kann daher ε nicht einfach Null setzen.

Unter Berücksichtigung der Eigenwertgleichung $(\mathscr{H}_0 - E_a)\,|u_a^0\rangle = 0$ können wir hierfür auch schreiben

$$\boxed{|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\varepsilon\to+0}\left(1 + \frac{1}{E_a - \mathscr{H} + \mathrm{i}\varepsilon}\mathscr{V}\right)|u_a^0\rangle, \quad (\varepsilon > 0)}. \tag{9}$$

Multipliziert man die Gl. (8) mit $E_a - \mathscr{H} + \mathrm{i}\varepsilon$, so ergibt sich

$$\lim_{\varepsilon\to+0}(E_a - \mathscr{H} + \mathrm{i}\varepsilon)\,|u_a^{(+)}\rangle = \lim_{\varepsilon\to+0}\mathrm{i}\varepsilon\,|u_a^0\rangle$$

oder

$$\boxed{\mathscr{H}\,|u_a^{(+)}\rangle = E_a\,|u_a^{(+)}\rangle}, \tag{10}$$

d. h., die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind Eigenvektoren des HAMILTON-Operators $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{V}$ zu den kontinuierlichen Eigenwerten E_a. Die Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ sind auf δ-Funktion normiert (Aufg. 119). Wie wir im § 2 sehen werden, sind die $|u_a^{(+)}\rangle$ gerade jene Eigenvektoren, die in der Ortsdarstellung der *Ausstrahlungsbedingung* [Gl. (1.5–73)] genügen.

Mit der Operatordefinition

$$\mathscr{G}^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E - \mathscr{H} \pm \mathrm{i}\varepsilon}, \quad (\varepsilon > 0) \tag{11}$$

erhält man

$$|u^{(\pm)}\rangle = (1 + \mathscr{G}^{(\pm)}\mathscr{V})\,|u^0\rangle. \tag{12}$$

Die Vektoren $|u^{(-)}\rangle$ werden uns später noch begegnen.

Der Streuzustand $|\Phi(t)\rangle$ zu einer endlichen Zeit ist nach Gl. (7) eine Linearkombination der Eigenvektoren $|u_a^{(+)}\rangle$,

$$\boxed{|\Phi(t)\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_a c(a)\, e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_a t}\,|u_a^{(+)}\rangle\, da}. \tag{13}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $c(a)$ sind diejenigen der einfallenden, kräftefreien Welle (3). Gebundene Eigenzustände, die $\mathscr{H}$ besitzen kann, gehen in die Streuung nicht ein. Bevor wir das Verhalten der Streuwelle (13) für $t \to +\infty$ untersuchen, wollen wir die Eigenschaften der Vektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ und ihre Berechnung besprechen.

Aufg. 119: Man bestimme $\langle u_{a'}^{(+)} \mid u_a^{(+)}\rangle$.

§ 2. Bestimmung der Eigenvektoren $|u^{(+)}\rangle$ von $\mathscr{H}$

a) Die Integralgleichung der Streuung. Die Streuamplitude

Mit den Gleichungen (8) bzw. (9), die Eigenvektoren $|u_a^{(+)}\rangle$ von $\mathscr{H}$ definieren, ist es in praktischen Fällen nicht möglich, diese Vektoren zu berechnen.

Um eine hierfür geeignete Beziehung zu finden, addieren wir $(E_a - \mathscr{H}_0)\,|u_a^0\rangle = 0$ zur rechten Seite von Gl. (8) und lösen nach $|u_a^0\rangle$ auf,

$$\begin{aligned} |u_a^0\rangle &= \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{E_a - \mathscr{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon}\,(E_a - \mathscr{H} + \mathrm{i}\,\varepsilon)\,|u_a^{(+)}\rangle \\ &= \lim_{\varepsilon\to+0}\left(1 - \frac{1}{E_a - \mathscr{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon}\,\mathscr{V}\right)|u_a^{(+)}\rangle . \end{aligned} \tag{14}$$

Mit der Definition des Operators

$$\mathscr{G}_0^{(+)} = \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{E_a - \mathscr{H}_0 + \mathrm{i}\varepsilon} \tag{15}$$

erhalten wir die für die Bestimmung von $|u_a^{(+)}\rangle$ wichtige Beziehung

$$\boxed{|u_a^{(+)}\rangle = |u_a^0\rangle + \mathscr{G}_0^{(+)}\,\mathscr{V}\,|u_a^{(+)}\rangle}\,. \tag{16}$$

Projizieren wir diese Gleichung auf irgendeine Basis $|v_\Lambda\rangle$ des Hilbert-Raums, so ergibt sich

$$\langle v_\Lambda|u_a^{(+)}\rangle = \langle v_\Lambda|u_a^0\rangle + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda'}\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda''} \langle v_\Lambda|\mathscr{G}_0^{(+)} v_{\Lambda'}\rangle\langle v_{\Lambda'}|\mathscr{V} v_{\Lambda''}\rangle\langle v_{\Lambda''}|u_a^{(+)}\rangle\,\mathrm{d}\Lambda'\,\mathrm{d}\Lambda'' , \tag{17}$$

d. h. eine *Integralgleichung* für die unbekannte Funktion $\langle v_\Lambda \mid u_a^{(+)}\rangle = u_a^{(+)}(\Lambda)$,

$$u_a^{(+)}(\Lambda) = u_a^0(\Lambda) + \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda'}\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{\Lambda''} G_0^{(+)}(\Lambda, \Lambda')\,V(\Lambda', \Lambda'')\,u_a^{(+)}(\Lambda'')\,\mathrm{d}\Lambda'\,\mathrm{d}\Lambda'' . \tag{17a}$$

Dabei sind also $V(\Lambda', \Lambda'') = \langle v_{\Lambda'} \mid \mathscr{V}\, v_{\Lambda''}\rangle$ die Matrixelemente des Streupotentials, $G_0^{(+)}(\Lambda, \Lambda') = \langle v_\Lambda \mid \mathscr{G}_0^{(+)}\, v_{\Lambda'}\rangle$ die des Operators (15) (Green*sche Funktion der Streuung*).

In der Impulsdarstellung ($|v_\Lambda\rangle \to |u_\mathfrak{p}\rangle$ = Impuls-Eigenvektoren) ist wegen $\mathscr{H}_0 = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}$ die Greensche Funktion diagonal,

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{p}, \mathfrak{p}') = \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{E_a - \frac{\mathfrak{p}^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon}\,\delta(\mathfrak{p} - \mathfrak{p}'), \tag{18}$$

so daß die Integralgleichung die Form

$$u_a^{(+)}(\mathfrak{p}) = u_a^0(\mathfrak{p}) + \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{E_a - \frac{\mathfrak{p}^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon} \int V(\mathfrak{p}, \mathfrak{p}')\,u_a^{(+)}(\mathfrak{p}')\,\mathrm{d}^3p' \tag{19}$$

annimmt. Hat man das einfallende Wellenpaket speziell nach ebenen Wellen $|u_a^0\rangle \to |u_\mathfrak{k}\rangle$ entwickelt, so wird $u_a^0(\mathfrak{p}) \to u_\mathfrak{k}(\mathfrak{p}) = \hbar^{3/2}\,\delta(\mathfrak{p} - \hbar\mathfrak{k})$.

Die *Ortsdarstellung* der Greenschen Funktion erhalten wir am einfachsten aus der Impulsdarstellung durch Einfügen von Impulszwischenzuständen,

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = \langle u_\mathfrak{r} \mid \mathscr{G}_0^{(+)}\, u_{\mathfrak{r}'}\rangle = \int\!\!\int \langle u_\mathfrak{r} \mid u_\mathfrak{p}\rangle\,\langle u_\mathfrak{p} \mid \mathscr{G}_0^{(+)}\, u_{\mathfrak{p}'}\rangle\,\langle u_{\mathfrak{p}'} \mid u_{\mathfrak{r}'}\rangle\,\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}^3p' .$$

Wegen $\langle u_{\mathfrak{r}} \mid u_{\mathfrak{p}}\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{+\frac{i}{\hbar}\mathfrak{r}\mathfrak{p}}$ ergibt sich damit

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\varepsilon\to+0} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\mathfrak{r}-\mathfrak{r}')\mathfrak{p}}}{E_a - \frac{\mathfrak{p}^2}{2m} + i\varepsilon} d^3p. \tag{20}$$

Zur Berechnung dieses Integrals führen wir für $\mathfrak{p}$ Polarkoordinaten mit der Polarachse in Richtung von $\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'$ ein ($R = |\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|$),

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \lim_{\varepsilon\to+0} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}Rp\cos\vartheta}}{E_a - \frac{p^2}{2m} + i\varepsilon} p^2\,dp \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi.$$

Die Integration über die Winkel liefert $\frac{2\pi\hbar}{iRp}\left(e^{\frac{i}{\hbar}Rp} - e^{-\frac{i}{\hbar}Rp}\right)$. Das verbleibende Integral

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = \frac{2m}{(2\pi\hbar)^2 iR} \lim_{\varepsilon\to+0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}Rp}\, p\,dp}{2m(E_a + i\varepsilon) - p^2}$$

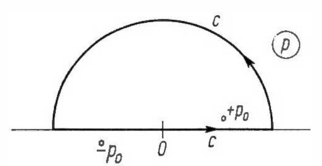


Fig. 87. Der Integrationsweg C in der komplexen p-Ebene

berechnen wir in der komplexen p-Ebene (Fig. 87). Es ist gleich dem Integral über den Weg C, weil für $p \to \infty$ das Integral über den Halbkreis verschwindet. Da der Integrand an den Stellen $p = \pm p_0 = \pm\sqrt{2m(E_a + i\varepsilon)}$ Pole besitzt, ist das Integral $2\pi i$-mal dem Residuum an der Stelle $+p_0$. Man sieht hier explizit die Bedeutung von ε: Sein Vorzeichen sondert die richtige Lösung aus. Für das Residuum ergibt sich der Wert $-\frac{1}{2} e^{\frac{i}{\hbar}Rp_0}$, der für $\varepsilon \to 0$ zu $-\frac{1}{2} e^{ik_aR}$ wird ($k_a = \sqrt{2mE_a/\hbar^2}$). Die GREENsche Funktion lautet daher

$$G_0^{(+)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ik_a|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}, \tag{21}$$

so daß sich als Integralgleichung für die Eigenfunktionen $u_a^{(+)}(\mathfrak{r})$ ergibt

$$\boxed{u_a^{(+)}(\mathfrak{r}) = u_a^0(\mathfrak{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik_a|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} V(\mathfrak{r}')\, u_a^{(+)}(\mathfrak{r}')\, d^3x'}\,. \tag{22}$$

Hat man das einfallende Wellenpaket nach ebenen Wellen entwickelt ($a \to \mathfrak{k}$), so wird

$$u_{\mathfrak{k}}^0(\mathfrak{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}. \tag{23}$$

Die durch Gl. (12) eingeführten Eigenvektoren $|u^{(-)}\rangle$ von $\mathscr{H}$ genügen der Gleichung

$$|u^{(-)}\rangle = |u^0\rangle + \mathscr{G}_0^{(-)} \mathscr{V} |u^{(-)}\rangle, \tag{16$^-$}$$

wobei

$$\mathscr{G}_0^{(-)} = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{E - \mathscr{H}_0 - \mathrm{i}\varepsilon} \qquad (\varepsilon > 0) \tag{15$^-$}$$

ist. Für die Matrixelemente $G_0^{(-)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}')$ dieses Operators liefert bei der komplexen Integration der Pol $p = -\sqrt{2m(E - \mathrm{i}\varepsilon)}$ einen Beitrag, dessen Residuum auf

$$G_0^{(-)}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}}{|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|} \tag{21$^-$}$$

führt. $G_0^{(-)}$ nennt man die *retardierte*, $G_0^{(+)}$ die *avancierte* GREENsche Funktion.

Wir wollen das *asymptotische Verhalten* der Lösung $u_a^{(+)}(\mathfrak{r})$ für Entfernungen r des Aufpunktes vom Streuzentrum, die groß gegen die Reichweite des Potentials sind, untersuchen. In diesem Fall, $r \gg r'$ (Fig. 86), genügt es, im Nenner $|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|$ durch r zu ersetzen, während man im rasch veränderlichen Exponenten die Näherung

$$|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'| \approx r - \mathfrak{e}\mathfrak{r}'$$

ausführt ($\mathfrak{e} = \frac{\mathfrak{r}}{r}$ = Einheitsvektor in Richtung zum Aufpunkt). Zusammen mit Gl. (23) erhält man damit als asymptotisches Verhalten

$$\boxed{u_{\mathfrak{k}}^{(+)}(\mathfrak{r}) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \left\{ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathfrak{k}\mathfrak{r}} + f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \right\}, \quad \text{für } r \to \infty}\,, \tag{24}$$

d. h. eine ebene Welle und eine Kugelwelle. Diese asymptotische Form ist für große r Eigenfunktion von $\mathscr{H}_0$. Die Größe $f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e})$, die man *Streuamplitude* für die Richtung $\mathfrak{e}$ nennt, ist gegeben durch

$$\boxed{f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) = -\frac{\sqrt{2}\,\pi m}{\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\mathfrak{e}\mathfrak{r}'} V(\mathfrak{r}')\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}(\mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3x'}\,. \tag{25}$$

Sie hat die Dimension einer Länge. Setzt man $k\mathfrak{e} = \mathfrak{q}$, so kann man wegen $\langle u_{\mathfrak{q}} | u_{\mathfrak{r}}\rangle = (2\pi)^{-3/2}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathfrak{q}\mathfrak{r}}$ auch schreiben

$$f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int \langle u_{\mathfrak{q}} | \mathscr{V} u_{\mathfrak{r}'}\rangle \langle u_{\mathfrak{r}'} | u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle\, \mathrm{d}^3x',$$

d. h., die Streuamplitude ist das Skalarprodukt

$$\boxed{f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_{\mathfrak{q}} | \mathscr{V} u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle} \qquad (\mathfrak{q} = k\mathfrak{e}), \tag{26}$$

das man in irgendeiner Darstellung — also nicht unbedingt in der Ortsdarstellung (25) — berechnen kann.

b) Die Bornsche Näherung

Es wird ein Näherungsverfahren entwickelt, das $|u_a^{(+)}\rangle$ als eine Entwicklung nach Potenzen des Störpotentials $\mathcal{V}$ angibt. Ohne auf die genauen Bedingungen einer solchen Entwickelbarkeit einzugehen, können wir sagen, daß sie für Streuprobleme gut sein wird, in denen die einfallende Welle durch das Potential nur „wenig" verändert wird.

Wir erhalten diese BORNsche Näherung, indem wir Gl. (16) iterativ lösen. Für $\mathcal{V} = \mathcal{O}$ wäre $|u_a^{(+)0}\rangle = |u_a^0\rangle$. Setzen wir diese nullte Näherung wieder auf der rechten Seite von (16) ein, so erhalten wir in erster Näherung

$$|u_a^{(+)1}\rangle = |u_a^0\rangle + \mathcal{G}_0^{(+)} \mathcal{V} \, |u_a^0\rangle. \tag{27}$$

Wiederholt man dieses Verfahren, so erhält man schließlich

$$|u_a^{(+)}\rangle = (\mathcal{1} + \mathcal{G}_0^{(+)} \mathcal{V} + (\mathcal{G}_0^{(+)} \mathcal{V})^2 + \cdots) \, |u_a^0\rangle, \tag{28}$$

wobei $|u_a^0\rangle = |u_\mathfrak{k}\rangle$ zu setzen ist, wenn man das Wellenpaket nach ebenen Wellen entwickelt hat.

Die Streuamplitude ergibt sich in erster BORNscher Näherung, wenn man $|u_\mathfrak{k}^{(+)}\rangle \approx |u_\mathfrak{k}\rangle$ in Gl. (26) einsetzt,

$$f_\mathfrak{k}^1(\mathfrak{e}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle u_\mathfrak{q} \,|\, \mathcal{V} \, u_\mathfrak{k}\rangle. \tag{29}$$

In der Ortsdarstellung lautet diese Näherung

$$\boxed{f_\mathfrak{k}^1(\mathfrak{e}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathfrak{k}-\mathfrak{q})\mathfrak{r}} V(\mathfrak{r}) \, d^3x}, \quad (\mathfrak{q} = k\mathfrak{e}), \tag{29a}$$

d. h., die Streuamplitude ist in erster Näherung proportional der FOURIER-*Transformierten des Potentials.*

Für ein *kugelsymmetrisches* Potential $V(r)$ läßt sich die Winkelabhängigkeit ausführen. Zunächst ergibt sich in Polarkoordinaten (wenn wir die Polarachse in Richtung des Vektors $\mathfrak{k} - \mathfrak{q}$ legen)

$$f_\mathfrak{k}^1(\mathfrak{e}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} e^{i|\mathfrak{k}-\mathfrak{q}| r\cos\vartheta} \, V(r) \, r^2 \, dr \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi.$$

Die Winkelintegration führt auf

$$\boxed{f^1(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 \varkappa} \int_0^{\infty} V(r) \, r \sin \varkappa r \, dr}, \tag{30}$$

wobei

$$\varkappa = |\mathfrak{k} - \mathfrak{q}| = |\mathfrak{k} - k\mathfrak{e}| = 2k \sin\frac{\theta}{2} \tag{31}$$

durch den Streuwinkel θ (Fig. 86) bestimmt ist.

c) Streuung am Yukawa- und Coulomb-Potential

Als Wechselwirkung zwischen zwei Nukleonen spielt das YUKAWA-Potential

$$V(r) = g^2 \frac{e^{-r/r_0}}{r} \tag{32}$$

eine wichtige Rolle. r_0 ist ein Maß für die Reichweite der Kernkräfte ($r_0 \approx 10^{-13}$ cm). Für die Streuung an einem solchen Potential ergibt sich nach Gl. (30) in erster Näherung die Streuamplitude

$$f^1(\theta) = -\frac{2mg^2}{\hbar^2 \varkappa}\int_0^\infty e^{-r/r_0}\sin\varkappa r\,dr = -\frac{2mg^2}{\hbar^2\varkappa}\,\mathrm{Im}\int_0^\infty e^{-\left(\frac{1}{r_0}-i\varkappa\right)r}\,dr$$

$$= -\frac{2mg^2}{\hbar^2\varkappa}\,\mathrm{Im}\,\frac{\frac{1}{r_0}+i\varkappa}{\left(\frac{1}{r_0}\right)^2+\varkappa^2},$$

oder

$$f^1(\theta) = -\frac{2mg^2}{\hbar^2}\,\frac{1}{\left(\frac{1}{r_0}\right)^2+\left(2k\sin\frac{\theta}{2}\right)^2}. \tag{33}$$

Für $2k \ll \frac{1}{r_0}$, d. h. für niedrige Energien $E \ll \frac{\hbar^2}{8\,m\,r_0^2}$, wird die Streuamplitude unabhängig vom Winkel θ.

In der Grenze $r_0 \to \infty$ geht das Potential (32) in das COULOMB-Potential ($g \to q$) über. Führen wir diesen Limes in der Beziehung (33) aus, und ersetzen wir $\hbar^2 k^2/2\,m$ durch die Energie E der Teilchen, so erhalten wir als Streuamplitude im COULOMB-Potential

$$f(\theta) = -\frac{q^2}{4E}\,\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}. \tag{34}$$

Sie ist für alle Energien winkelabhängig. Es ist zu bemerken, daß dieses in erster BORNscher Näherung gewonnene Ergebnis zufälligerweise sogar mit der exakten Streuamplitude übereinstimmt.

§ 3. Diskussion des gestreuten Wellenpaketes. Der Wirkungsquerschnitt

Entwickelt man das kräftefreie, einfallende Wellenpaket speziell nach ebenen Wellen (Impulseigenfunktionen),

$$\lim_{t\to-\infty}\Phi(\mathfrak{r},t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\int c(\mathfrak{k})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E(k)t}\,e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}\,d^3k, \tag{35}$$

mit

$$E(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad\text{und}\quad \int |c(\mathfrak{k})|^2\,d^3k = 1,$$

so lautet die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Phi(\mathfrak{r}, t)$ für endliche Zeiten durch die Einwirkung des Potentials nach Gl. (13)

$$\Phi(\mathfrak{r}, t) = \int c(\mathfrak{k})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E(k) t}\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}(\mathfrak{r})\, d^3k. \tag{36}$$

Nach der Streuung befindet sich das Wellenpaket in großer Entfernung vom Streuzentrum. Man kann daher für $t \to +\infty$ in Gl. (36) die Funktionen $u_{\mathfrak{k}}^{(+)}(\mathfrak{r})$ durch ihre asymptotische Entwicklung (24) ersetzen, so daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude für das auslaufende Teilchen gegeben ist durch

$$\lim_{t \to +\infty} \Phi(\mathfrak{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int c(\mathfrak{k})\, e^{-\frac{i}{\hbar} E(k) t} \left(e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}} + f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) \frac{e^{ikr}}{r} \right) d^3k. \tag{37}$$

Sie besteht aus einem in der Einfallrichtung weiterlaufenden Paket und einer nach allen Richtungen gestreuten Welle (Fig. 86, S. 367).

Wenn wir annehmen, daß das einfallende Paket einen verhältnismäßig scharfen Impuls $\mathfrak{p}_0 = \hbar \mathfrak{k}_0$ besitzt, so daß die Funktion $c(\mathfrak{k})$ ein ausgeprägtes Maximum für $\mathfrak{k} = \mathfrak{k}_0$ aufweist (Fig. 12, S. 52), so kann man das Zerfließen des Wellenpaketes vernachlässigen. Zur Diskussion des Streuzustandes in diesem wichtigen Fall entwickeln wir die in Gl. (37) auftretenden Funktionen von $\mathfrak{k}$ um die Stelle $\mathfrak{k}_0$, d. h., wir machen eine Entwicklung nach $\mathfrak{k}' = \mathfrak{k} - \mathfrak{k}_0$. Ist $\mathfrak{e}_0 = \mathfrak{k}_0/k_0$ die Einfallrichtung ($\mathfrak{e}$ hingegen war die Richtung des Aufpunkts $\mathfrak{r}$!), so erhalten wir

$$k \approx k_0 + \mathfrak{e}_0 \mathfrak{k}',$$

$$E(k) \approx E_0 + \hbar \mathfrak{v}_0 \mathfrak{k}' \quad (\mathfrak{v}_0 = \text{Einfallgeschwindigkeit des Teilchens}).$$

In der Streuamplitude $f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) = |f|\, e^{i\alpha}$ entwickeln wir die Phase $\alpha(\mathfrak{k}, \mathfrak{e}) \approx \alpha(\mathfrak{k}_0, \mathfrak{e}) + \mathfrak{k}' \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}_0} \alpha$, so daß sich mit der Abkürzung

$$\mathfrak{a}_0(\mathfrak{e}) = \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}_0} \alpha \tag{38}$$

für die Streuamplitude näherungsweise ergibt

$$f_{\mathfrak{k}}(\mathfrak{e}) \approx f_0(\mathfrak{e})\, e^{i\mathfrak{k}'\mathfrak{a}_0(\mathfrak{e})}.$$

Setzen wir diese Entwicklungen in Gl. (37) ein, so können wir die konstanten Terme vor das Integral ziehen und erhalten

$$\begin{aligned} \lim_{t \to \infty} \Phi(\mathfrak{r}, t) = {} & \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathfrak{p}_0\mathfrak{r} - E_0 t)} \int c(\mathfrak{k}' + \mathfrak{k}_0)\, e^{i\mathfrak{k}'(\mathfrak{r} - \mathfrak{v}_0 t)}\, d^3k' + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} f_0(\mathfrak{e}) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - E_0 t)}}{r} \int c(\mathfrak{k}' + \mathfrak{k}_0)\, e^{i\mathfrak{k}'\{\mathfrak{e}_0 \cdot (r - v_0 t) + \mathfrak{a}_0(\mathfrak{e})\}}\, d^3k'. \end{aligned} \tag{39}$$

Schreibt man für die Einhüllende des einfallenden Wellenpaketes zur Zeit $t = 0$

$$A(\mathfrak{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^3} \int c(\mathfrak{k}' + \mathfrak{k}_0)\, e^{i\mathfrak{k}'\mathfrak{r}}\, d^3k', \tag{40}$$

mit der Normierung

$$\int |A(\mathfrak{r})|^2 \, d^3x = 1, \tag{41}$$

so erhält man für den auslaufenden Zustand

$$\boxed{\begin{aligned} \lim_{t\to+\infty} \Phi(\mathfrak{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathfrak{p}_0\mathfrak{r} - E_0 t)} A(\mathfrak{r} - \mathfrak{v}_0 t) + \\ + f_0(\mathfrak{e}) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 r - E_0 t)}}{r} A\big(\mathfrak{e}_0 \cdot (r - v_0 t) + \mathfrak{a}_0(\mathfrak{e})\big) \end{aligned}} \, . \tag{42}$$

Der erste Term ist das ungestört durchgelaufene Paket. Seine Einhüllende bewegt sich mit der Einfallgeschwindigkeit $\mathfrak{v}_0$. Der zweite Term, die gestreute Welle, ist eine auslaufende Kugelwelle mit der Gruppengeschwindigkeit v_0. Die Form ihrer Einhüllenden ist durch jene der einfallenden Welle gegeben. Gegenüber dem ungestört durchgelaufenen Paket kann sie eine Versetzung besitzen, die durch den Vektor $\mathfrak{a}_0(\mathfrak{e})$ gegeben ist.

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem Detektor zu finden, der in der Richtung $\mathfrak{e}$ so aufgestellt sei, daß die durchgehende Welle an ihm vorbeigeht (Fig. 86), ist gegeben durch

$$\begin{aligned} w(\mathfrak{e})\, d\Omega &= d\Omega \int_0^\infty |\Phi_{\text{Str}}(\mathfrak{r}, t)|^2 \, r^2 \, dr = \\ &= d\Omega \, |f_0(\mathfrak{e})|^2 \int_0^\infty |A(\mathfrak{e}_0 \cdot (r - v_0 t) + \mathfrak{a}_0)|^2 \, dr. \end{aligned} \tag{43}$$

Sie ist also bestimmt durch das Absolutquadrat der Streuamplitude und einen Faktor, der von der speziellen Gestalt des Wellenpaketes abhängig ist. Setzt man $r - v_0 t = \zeta$ und berücksichtigt man die räumliche Konzentration des einfallenden Wellenpaketes, so kann man ohne merklichen Fehler die untere Integrationsgrenze nach $-\infty$ verlegen,

$$w(\mathfrak{e}) = |f_0(\mathfrak{e})|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |A(\mathfrak{e}_0 \zeta + \mathfrak{a}_0)|^2 \, d\zeta. \tag{44}$$

Läßt man einen räumlich gleichmäßig verteilten Teilchenfluß einfallen, so ist über die verschiedenen Stoßparameter zu mitteln [1]), so daß aus dem einfachen Integral ein dreifaches wird, welches wegen der Normierung von A aber eins ist. In diesem Fall wird die Wahrscheinlichkeit

$$\overline{w(\mathfrak{e})} = |f_0(\mathfrak{e})|^2 \tag{45}$$

unabhängig von der Paketform.

---

[1]) Die einfallenden Teilchen bilden ein Gemisch, so daß die quantentheoretischen Wahrscheinlichkeiten zu mitteln sind (Kap. 3.7).

Das Absolutquadrat der Streuamplitude (von der Dimension einer Fläche) nennt man den *differentiellen Wirkungsquerschnitt*

$$\boxed{\sigma^{\text{el}}(\mathfrak{e}, \mathfrak{k}_0) = |f_0(\mathfrak{e})|^2} \tag{46}$$

für die elastische Streuung von Teilchen des Impulses $\mathfrak{p}_0 = \hbar \mathfrak{k}_0$ in Richtung $\mathfrak{e}$. Das Integral über den gesamten räumlichen Winkel

$$\sigma^{\text{el}}(\mathfrak{k}_0) = \int |f_0(\mathfrak{e})|^2 \, \mathrm{d}\Omega \tag{47}$$

heißt der totale, elastische Wirkungsquerschnitt.

Aufg. 120: Man untersuche die eindimensionale Potentialstreuung.

Aufg. 121: Wie lauten für die Streuung am Potential $V(x) = -\hat{V} \cdot \delta(x)$ die Funktionen $u_k^{(+)}(p)$ und $u_k^{(+)}(x)$?

Aufg. 122: Wie hängt der Wirkungsquerschnitt für die Streuung an einem kugelsymmetrischen Potential $V(r)$ von den durch Gl. (4.3–91) definierten Streuphasen δ_l ab?

§ 4. Die Streumatrix. Das optische Theorem

Für die Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang eines Streuprozesses ist der Zustandsvektor $|\Phi(t)\rangle$ zu einer endlichen Zeit von geringer Bedeutung. Was wirklich interessiert, ist lediglich der Zusammenhang zwischen den kräftefreien Zuständen am Anfang ($t \to -\infty$) und am Ende ($t \to +\infty$) der Wechselwirkung. Unter diesem Gesichtspunkt wollen wir die Streutheorie noch einmal formulieren. Entwickeln wir den Endzustand nach *denselben* Basisvektoren $|u_a^0\rangle$ (Eigenvektoren von $\mathscr{H}_0$) wie den Anfangszustand,

$$\lim_{t \to -\infty} |\Phi^S(t)\rangle = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_a c(a) \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_a t} |u_a^0\rangle \, \mathrm{d}a, \tag{48^S}$$

$$\lim_{t \to +\infty} |\Phi^S(t)\rangle = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_a \hat{c}(a) \, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_a t} |u_a^0\rangle \, \mathrm{d}a, \tag{49^S}$$

so besteht das Streuproblem darin, die unbekannte Funktion $\hat{c}(a)$ aus der vorgegebenen Anfangsverteilung $c(a)$ zu berechnen.

Die direkte Beantwortung dieser Frage geschieht am einfachsten im Wechselwirkungsbild, in dem die kräftefreien Zustände (48) und (49) wegen $|\Phi^W(t)\rangle = \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t} |\Phi^S(t)\rangle$ [vgl. Gl. (3.5–112)] zeitunabhängig werden,

$$\lim_{t \to -\infty} |\Phi^W(t)\rangle = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_a c(a) \, |u_a^0\rangle \, \mathrm{d}a, \tag{48^W}$$

$$\lim_{t \to +\infty} |\Phi^W(t)\rangle = \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_a \hat{c}(a) \, |u_a^0\rangle \, \mathrm{d}a \tag{49^W}$$

(dabei ist für den Zeitpunkt t_*, in dem das SCHRÖDINGER-Bild mit dem Wechselwirkungsbild übereinstimmen soll, willkürlich $t_* = 0$ gesetzt worden). Da im Wechselwirkungsbild für den Zustandsvektor zwischen irgend zwei Zeiten t und t_0 der Zusammenhang

$$|\Phi^W(t)\rangle = \mathscr{C}^W(t, t_0)\,|\Phi^W(t_0)\rangle \tag{50}$$

besteht, wobei nach Gl. (3.5–113)

$$\mathscr{C}^W(t, t_0) = \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}_0 t_0}\ {}^{1)} \tag{51}$$

ist, erhalten wir

$$\langle u_a^0\,|\,\Phi^W(t)\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{a'} \langle u_a^0\,|\,\mathscr{C}^W(t, t_0)\,u_{a'}^0\rangle\,\langle u_{a'}^0\,|\,\Phi^W(t_0)\rangle\,\mathrm{d}a'\,. \tag{52}$$

Die Grenzwerte

$$\begin{aligned} c(a) &= \lim_{t_0\to-\infty} \langle u_a^0\,|\,\Phi^W(t_0)\rangle\,,\\ \hat{c}(a) &= \lim_{t\to+\infty} \langle u_a^0\,|\,\Phi^W(t)\rangle \end{aligned} \tag{53}$$

stehen daher in dem Zusammenhang

$$\boxed{\hat{c}(a) = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{a'} S(a, a')\,c(a')\,\mathrm{d}a'}\,. \tag{54}$$

Dabei ist die Matrix $S(a, a')$, die man *Streumatrix* oder *S-Matrix* nennt, durch

$$\begin{aligned} S(a, a') &= \lim_{\substack{t\to+\infty\\ t_0\to-\infty}} \langle u_a^0\,|\,\mathscr{C}^W(t, t_0)\,u_{a'}^0\rangle = \\ &= \lim_{\substack{t\to+\infty\\ t_0\to-\infty}} \langle \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_a-\mathscr{H})t}\,u_a^0\,|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_{a'}-\mathscr{H})t_0}\,u_{a'}^0\rangle \end{aligned} \tag{55}$$

gegeben. Zur Berechnung dieser Grenzwerte gehen wir wieder wie in § 1 vor. Verwenden wir neben der Beziehung (6) noch die entsprechende Relation

$$\lim_{t\to+\infty} F(t) = \lim_{\varepsilon\to+0} \varepsilon \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\varepsilon t'}\,F(t')\,\mathrm{d}t' \qquad (\varepsilon > 0)\,, \tag{56}$$

so erhalten wir nach der dort geschilderten Weise für die Grenzwerte

$$\begin{aligned} \lim_{t\to\pm\infty} |\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E-\mathscr{H})t}\,u^0\rangle &= \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\mp(E-\mathscr{H})+\mathrm{i}\varepsilon}\,|u^0\rangle = \\ = \lim_{\varepsilon\to+0}\left(1 + \frac{1}{E-\mathscr{H}\mp\mathrm{i}\varepsilon}\,\mathscr{V}\right)|u^0\rangle &\equiv \left(1 + \mathscr{G}^{(\mp)}\,\mathscr{V}\right)|u^0\rangle \equiv |u^{(\mp)}\rangle\,, \end{aligned} \tag{57}$$

wobei wir noch die Definitionen (11) und (12) verwendet haben. Die S-Matrix ist also gegeben durch die Skalarprodukte der Vektoren $|u_a^{(-)}\rangle$ und $|u_{a'}^{(+)}\rangle$,

$$\boxed{S(a, a') = \langle u_a^{(-)}\,|\,u_{a'}^{(+)}\rangle}\,. \tag{58}$$

---

[1]) Operatoren ohne oberen Index sind im SCHRÖDINGER-Bild gemeint.

Aus der letzten der Gln. (57) folgt

$$|u_a^{(-)}\rangle = |u_a^{(+)}\rangle + (\mathscr{G}_a^{(-)} - \mathscr{G}_a^{(+)})\,\mathscr{V}\,|u_a^0\rangle,$$

so daß man für $\langle u_{a'}^{(+)} \,|\, u_a^{(-)}\rangle^*$ erhält

$$S(a, a') = \delta(a, a') + \langle u_a^0 \,|\, \mathscr{V}(\mathscr{G}_a^{(+)} - \mathscr{G}_a^{(-)})\, u_{a'}^{(+)}\rangle .$$

Zur Bestimmung des Vektors $(\mathscr{G}_a^{(+)} - \mathscr{G}_a^{(-)})\,|u_{a'}^{(+)}\rangle$ verwenden wir die Definition (11) und beachten, daß $|u_{a'}^{(+)}\rangle$ Eigenvektor von $\mathscr{H}$ zum Eigenwert $E_{a'}$ ist,

$$\begin{aligned}(\mathscr{G}_a^{(+)} - \mathscr{G}_a^{(-)})\,|u_{a'}^{(+)}\rangle &= \lim_{\varepsilon\to+0}\left(\frac{1}{E_a - \mathscr{H} + \mathrm{i}\varepsilon} - \frac{1}{E_a - \mathscr{H} - \mathrm{i}\varepsilon}\right)|u_{a'}^{(+)}\rangle = \\ &= \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{-2\mathrm{i}\varepsilon}{(E_a - E_{a'})^2 + \varepsilon^2}\,|u_{a'}^{(+)}\rangle = -\,2\pi\mathrm{i}\,\delta(E_a - E_{a'})\,|u_{a'}^{(+)}\rangle;\end{aligned} \tag{59}$$

dabei haben wir von der Darstellung (5.1–6) der δ-Funktion Gebrauch gemacht. Für die S-Matrix erhalten wir damit das Ergebnis

$$\boxed{S(a, a') = \delta(a, a') - 2\pi\mathrm{i}\,\langle u_a^0 \,|\, \mathscr{V}\, u_{a'}^{(+)}\rangle\, \delta(E_a - E_{a'})}\,. \tag{60}$$

Damit ist der Zustand nach der Streuung [Gl. (49^S) bzw. (49^W)] völlig bestimmt. Der erste Term ergibt wieder die durchgehende Welle, der zweite beschreibt die Streuwelle. Verwendet man als Basissystem $|u_a^0\rangle$ Impulseigenvektoren $|u_{\mathfrak{k}}\rangle$, so ergibt die Integration (49^S) über $\mathfrak{k}$ für große Abstände r die auslaufende Kugelwelle (24). Das Matrixelement $\langle u_{k'\mathfrak{e}} \,|\, \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle$ haben wir bereits in Gl. (26) als Streuamplitude erkannt.

Es ist üblich, einen Operator $\mathscr{T}$ durch die Gleichung

$$\mathscr{T} = \mathscr{V}(\mathit{1} + \mathscr{G}^{(+)}\mathscr{V}) \tag{61}$$

einzuführen. Mit ihm schreibt sich

$$\langle u_a^0 \,|\, \mathscr{V}\, u_{a'}^{(+)}\rangle = \langle u_a^0 \,|\, \mathscr{T}\, u_{a'}^0\rangle \tag{62}$$

als Matrix in den freien Zuständen $|u_a^0\rangle$.

Aus der *Unitarität* der S-Matrix, die eine unmittelbare Folge der Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit ist [Gl. (3.5–31)], läßt sich ein wichtiges Theorem für den totalen Wirkungsquerschnitt herleiten. Die Matrixelemente, gebildet mit Impulseigenvektoren $|u_{\mathfrak{k}}\rangle$,

$$S(\mathfrak{k}, \mathfrak{k}') = \delta(\mathfrak{k} - \mathfrak{k}') - 2\pi\mathrm{i}\,\langle u_{\mathfrak{k}} \,|\, \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle\, \delta(E_k - E_{k'}), \tag{63}$$

liefern durch Einsetzen in die Unitaritätsbedingung (2.2–49)

$$\int_{\mathfrak{k}'} S(\mathfrak{k}, \mathfrak{k}')\, S^*(\mathfrak{k}'', \mathfrak{k}')\, \mathrm{d}^3k' = \delta(\mathfrak{k} - \mathfrak{k}'') \tag{64}$$

die Beziehung

$$2\pi i\left(\langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}''}^{(+)}\rangle - \langle u_{\mathfrak{k}''} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle^*\right) \delta(E_k - E_{k''}) =$$
$$= (2\pi)^2 \int_{\mathfrak{k}'} \langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle \langle u_{\mathfrak{k}''} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle^* \, \delta(E_k - E_{k'})\, \delta(E_{k''} - E_{k'})\, d^3k' . \tag{65}$$

Wegen $E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ kann man nach Gl. (5.1–21$_2$) für

$$\delta(E_k - E_{k'}) = \frac{m}{k\,\hbar^2}\, \delta(k - k') \tag{66}$$

schreiben, wobei berücksichtigt ist, daß k und k' definitionsgemäß nur positive Werte annehmen können, so daß der Term $\delta(k + k')$ keinen Beitrag liefert. Setzt man $d^3k' = k'^2\, dk'\, d\Omega'$, so läßt sich in Gl. (65) das Integral über den Radialanteil k' sofort ausführen,

$$\frac{i}{k}\left(\langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}''}^{(+)}\rangle - \langle u_{\mathfrak{k}''} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle^*\right) =$$
$$= \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_{\Omega'} \langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle \langle u_{\mathfrak{k}''} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle^* \, d\Omega' \qquad (|\mathfrak{k}| = |\mathfrak{k}'| = |\mathfrak{k}''|).$$

Wählen wir speziell $\mathfrak{k} = \mathfrak{k}''$, so erhalten wir

$$-\frac{2}{k}\, \mathrm{Im}\, \langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}}^{(+)}\rangle = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_{\Omega'} |\langle u_{\mathfrak{k}} \mid \mathscr{V}\, u_{\mathfrak{k}'}^{(+)}\rangle|^2 \, d\Omega' . \tag{67}$$

Die linke Seite ist nach Gl. (26) proportional dem Imaginärteil der Streuamplitude in Vorwärtsrichtung ($\mathfrak{q} = \mathfrak{k}$, d. h. $\theta = 0$), die rechte Seite proportional dem totalen Wirkungsquerschnitt. Die so gewonnene Beziehung

$$\boxed{\sigma_{\mathfrak{k}}^{\mathrm{tot}} = \frac{4\pi}{k}\, \mathrm{Im}\, f_{\mathfrak{k}}(\theta = 0)} \tag{68}$$

nennt man „*optisches Theorem*“. Es ist eine unmittelbare Folge der Unitarität der S-Matrix, d. h. der Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit beim Streuprozeß. Dieses Theorem gilt auch für den totalen Wirkungsquerschnitt nichtelastischer Streuung. Die Differenz gegenüber dem elastischen Wirkungsquerschnitt,

$$\sigma_{\mathfrak{k}}^{\mathrm{abs}} = \sigma_{\mathfrak{k}}^{\mathrm{tot}} - \sigma_{\mathfrak{k}}^{\mathrm{el}}, \tag{69}$$

ist ein Maß für die Absorption der einfallenden Teilchen (*Absorptionsquerschnitt*).

FÜNFTER TEIL

Anhang

Erstes Kapitel

Die Diracsche δ-Funktion

§ 1. Definition der δ-Funktion

Wir gehen aus von der Folge von Glockenkurven

$$y(x, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \qquad (\varepsilon > 0)\,, \tag{1}$$

Fig. 88. Verlauf der Funktionen $y(x, \varepsilon)$, $(\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$

die mit kleiner werdendem ε immer schmaler und höher werden (Fig. 88). Im Limes $\varepsilon \to 0$ verschwindet die Funktion für $x \neq 0$, während sie für $x = 0$ divergiert,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} y(x, \varepsilon) = \begin{cases} 0 & x \neq 0, \\ \infty & x = 0. \end{cases} \tag{2}$$

Die unter den Kurven (1) liegenden Flächen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y(x, \varepsilon)\, \mathrm{d}x = \frac{1}{\pi} \arctan \frac{x}{\varepsilon} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 1 \tag{3}$$

sind unabhängig von ε stets eins.

Nun betrachten wir für stetige Funktionen $f(x)$ das Integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, y(x, \varepsilon)\, \mathrm{d}x \tag{4}$$

als Funktion des Parameters ε. Für den Grenzwert $\varepsilon \to 0$ schreiben wir formal

$$\boxed{\lim_{\varepsilon \to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, y(x, \varepsilon)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta(x)\, \mathrm{d}x}\,. \tag{5}$$

Die auf diese Weise definierte DIRAC*sche „Funktion“* $\delta(x)$ ist ein Symbol und keine Funktion im Sinne der gewöhnlichen Analysis.[1]) Die Bildung des Grenzwertes $\varepsilon \to 0$ ist mit der Integration über x nicht vertauschbar. Schreibt man die Kurzform

$$\delta(x) = \text{"}\lim_{\varepsilon\to 0} y(x, \varepsilon)\text{"}, \tag{6}$$

so ist damit die *Vorschrift* verbunden, daß entsprechend Gl. (5) *vor der Limes-Bildung die Integration* über x auszuführen ist. Wir haben dies durch die " "-Zeichen zum Ausdruck gebracht, die jedoch in den anderen Teilen dieses Buches der Einfachheit halber weggelassen sind.

Zur Berechnung des Grenzwertes (5) machen wir im Integral (4) die Substitution $x = \varepsilon\xi$ und erhalten

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\varepsilon\xi) g(\xi)\,\mathrm{d}\xi = F(\varepsilon) \tag{7}$$

mit

$$g(\xi) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\xi^2+1} \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g(\xi)\,\mathrm{d}\xi = 1\,. \tag{8}$$

Bei gleichmäßiger Konvergenz des Integrals $F(\varepsilon)$[2]) ist (wegen der vorausgesetzten Stetigkeit von f) die Funktion $F(\varepsilon)$ stetig, so daß in Gl. (7) der Limes $\varepsilon \to 0$ unter dem Integral ausgeführt werden kann,

$$F(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(0) g(\xi)\,\mathrm{d}\xi = f(0)\,.$$

Für die durch Gl. (5) definierte δ-Funktion haben wir damit das Ergebnis

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0)} \tag{9}$$

gewonnen, d. h., die Integration über $f(x)\,\delta(x)$ liefert den Funktionswert $f(0)$. Für $f = 1$ ergibt sich insbesondere

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1.\,^{3)} \tag{10}$$

---

[1]) Vgl. M. J. LIGHTHILL, Fourier Analysis and Generalised Functions, Cambridge 1962. — Einen anderen mathematischen Zugang zur δ-Funktion liefert die „Distributionstheorie“ auf der Grundlage des Funktionalbegriffs (5.2 § 1). Vgl. dazu z. B. J. P. MARCHAND, Distributions, Amsterdam 1962, oder I. M. GELFAND u. G. E. SCHILOW, Verallgemeinerte Funktionen, Berlin 1960.

[2]) Dafür genügt z. B., daß f eine beschränkte Funktion ist. Dann gilt nämlich für den Betrag des Integranden $|f(\varepsilon\xi)\,g(\xi)| \leq M g(\xi)$ für alle ε und ξ. Weil außerdem das Integral über die positive Funktion $g(\xi)$ existiert, ist die gleichmäßige Konvergenz von $F(\varepsilon)$ gewährleistet (vgl. E. C. TITCHMARSH, The Theory of Functions, Oxford 1960).

[3]) Die δ-Funktion hat daher die Dimension $= \dim x^{-1}$.

Wegen des Grenzwertes $\varepsilon \to 0$ in Gl. (5) kann man in den Gleichungen (9) und (10) das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ auch durch eine Integration über ein kleines Intervall der Umgebung des Nullpunktes $(-a < x < +a)$ ersetzen,

$$\int_{-a}^{+a} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)\,. \tag{9a}$$

An Stelle der speziellen Funktion (1) lassen sich für $y(x, \varepsilon)$ auch andere Funktionen wählen, die bei gleichem Vorgehen ebenfalls auf die δ-Funktion führen, z. B.

$$\left.\begin{aligned} y(x, \varepsilon) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\varepsilon}\, e^{-\frac{x^2}{2\varepsilon^2}} \\ \text{oder} \quad &= \frac{1}{\pi\varepsilon}\left(\frac{\sin x/\varepsilon}{x/\varepsilon}\right)^2 \\ \text{oder} \quad &= \begin{cases} \dfrac{1}{\varepsilon} & \text{für} \quad |x| < \dfrac{\varepsilon}{2} \\ 0 & \text{für} \quad |x| > \dfrac{\varepsilon}{2}\,. \end{cases} \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

Für alle diese Funktionen gilt nämlich ebenfalls $y(x, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon}\, g(\xi)$ mit $\xi = x/\varepsilon$ und $\int_{-\infty}^{+\infty} g(\xi)\,d\xi = 1$, so daß man mit der obigen Argumentation wieder auf Gl. (9) geführt wird.

Die Bedeutung der δ-Funktion erhellt aus folgendem physikalischen Beispiel: Betrachtet man eine in der Grenze punktförmige Ladung q, die sich an der Stelle $x = 0$ befinden soll, so läßt sich diese formal auch als kontinuierliche Ladungsverteilung $\varrho(x)$ schreiben, wenn man

$$\varrho(x) = q\,\delta(x) \tag{12}$$

setzt. Für die Gesamtladung ergibt sich dann nämlich $\int \varrho(x)\,dx = q$.

Führt man in den Funktionen (1) eine Translation $x \to x - x'$ aus, so liegt das Maximum der Glockenkurven an der Stelle $x = x'$. In diesem Fall ersetzen wir in der Definitionsgleichung (5) $\delta(x)$ durch $\delta(x - x')$ und erhalten an Stelle von Gl. (9)

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x - x')\,dx = f(x')}\,. \tag{13}$$

Es ergibt sich der Wert der Funktion f an der Stelle x'. Entsprechend Gl. (9a) können wir das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ jetzt auch durch eine Integration über ein kleines Intervall der Umgebung x' ersetzen.

Die Beziehung (13) zeigt eine Analogie zwischen der DIRACschen δ-Funktion und dem KRONECKER-Symbol $\delta_{xx'}$ für diskretes x. Denn aus $\delta_{xx'} = \begin{cases} 0 \text{ für } x \neq x' \\ 1 \text{ für } x = x' \end{cases}$ [vgl. dazu Gl. (2)] folgt

$$\sum_x f_x \, \delta_{xx'} = f_{x'} \,. \tag{14}$$

Um diese beiden Fälle in einer einheitlichen Schreibweise unterzubringen, haben wir in 1.5 § 6 und 2.1 § 4ff. das Symbol $\delta(x, x')$ mit

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_x f(x)\, \delta(x, x') \mathrm{d}x = f(x') \tag{15}$$

eingeführt, was eine formale Zusammenfassung der Gleichungen (13) und (14) darstellt.

In *mehreren Variablen* $x_1, x_2, \ldots$ ist die δ-Funktion durch

$$\delta(x_1 - x_1', x_2 - x_2', \ldots) = \delta(x_1 - x_1')\, \delta(x_2 - x_2') \ldots \tag{16}$$

definiert. Sie hat die Eigenschaft

$$\int_G f(x_1, x_2, \ldots)\, \delta(x_1 - x_1', x_2 - x_2', \ldots)\, \mathrm{d}x_1\, \mathrm{d}x_2 \cdots = f(x_1', x_2', \ldots), \tag{17}$$

wobei die Integration über ein Gebiet G zu erstrecken ist, das den Punkt $(x_1', x_2', \ldots)$ enthält.

§ 2. Eigenschaften der δ-Funktion

1. Ist $g(x)$ eine stetige Funktion mit nur einfachen Nullstellen x_n,

$$g(x_n) = 0, \quad g'(x_n) \neq 0,$$

so gilt

$$\boxed{\delta[g(x)] = \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|}\, \delta(x - x_n)} \,. \tag{18}$$

Beweis: Wegen Gl. (9a) genügt es bei der Auswertung des Integrals

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta[g(x)]\, f(x)\, \mathrm{d}x\,,$$

allein die Beiträge zu betrachten, die von den Umgebungen der einzelnen Nullstellen x_n herrühren (Fig. 89),

$$\sum_n \int_{x_n - a}^{x_n + a} \delta[g(x)]\, f(x)\, \mathrm{d}x\,.$$

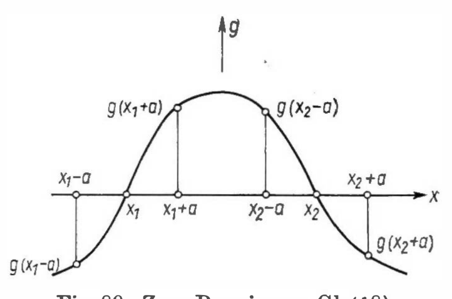


Fig. 89. Zum Beweis von Gl. (18)

Mit Hilfe der Umkehrfunktionen $x = x(g)$ in diesen Umgebungen lassen sich die einzelnen Beiträge als Integrale über g schreiben,

$$\sum_n \int_{g(x_n-a)}^{g(x_n+a)} \delta(g)\, f[x(g)] \frac{dg}{g'[x(g)]}.$$

Wegen Gl. (9a) sind diese Integrale aber gleich den Funktionswerten an den Stellen $g = 0$, so daß man mit $x(g = 0) = x_n$ erhält

$$\sum_n f(x_n) \frac{1}{|g'(x_n)|}.$$

Dabei ist der Betrag von g' zu nehmen, weil bei negativer Neigung von g die Integration in Richtung der negativen g-Achse [Fig. (89): $g(x_2 - a) \to g(x_2 + a)$] erfolgt. Den eben gewonnenen Ausdruck können wir aber auch in der Form

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_n \frac{1}{|g'(x_n)|} \delta(x - x_n) f(x)\, dx$$

schreiben, wodurch Gl. (18) bewiesen ist.

Aus Gl. (18) folgt etwa

$$\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|} \delta(x). \tag{19}$$

Setzt man insbesondere $\lambda = -1$, so ergibt sich, daß $\delta(x)$ eine *gerade* Funktion ist

$$\delta(-x) = \delta(x). \tag{20}$$

Weitere Beispiele zu Gl. (18) sind

$$\left.\begin{aligned} \delta[(x-\alpha)(x-\beta)] &= \frac{\delta(x-\alpha) + \delta(x-\beta)}{|\alpha - \beta|}, \\ \delta(x^2 - \alpha^2) &= \frac{\delta(x-\alpha) + \delta(x+\alpha)}{2|\alpha|}. \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

2. Aus Gl. (9) folgt eine weitere wichtige Eigenschaft der δ-Funktion. Ersetzen wir nämlich $f(x)$ durch $g(x)\, f(x)$, so erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x)\, f(x)\, \delta(x)\, dx = g(0)\, f(0) = g(0) \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta(x)\, dx.$$

Es gilt also

$$g(x)\, \delta(x) = g(0)\, \delta(x) \tag{22}$$

und daher insbesondere

$$x\, \delta(x) = 0. \tag{23}$$

3. Das FOURIERsche Integraltheorem (2.1 § 6) besagt, daß zwischen einer Funktion $f(x)$ und ihrer FOURIER-Transformierten $\varphi(k)$ die Zusammenhänge

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k)\, e^{ikx}\, dk,$$

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

bestehen. Setzen wir die FOURIER-Transformierte $\varphi(k)$ in die erste Zeile ein, so erhalten wir

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x')\, e^{ik(x-x')}\, dx'\, dk\,, \tag{24}$$

wobei die Integration über k *nach* jener über x' auszuführen ist. Vergleichen wir diese Beziehung mit Gl. (13), so erkennen wir

$$\boxed{\delta(x - x') = {}''\frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')}\, dk''} \tag{25}$$

(FOURIER-*Darstellung der δ-Funktion*). Die " "-Zeichen sollen die Vorschrift andeuten, daß die Integration über k erst *nach* der Integration über x' [Gl. (24)] auszuführen ist. Die Gl. (2.1–35) ist die Erweiterung der Beziehung (25) auf beliebige, vollständige, normierte Orthogonalfunktionen $u(k, x)$.

§ 3. Ableitungen der δ-Funktion

Wir bilden die Ableitung $\frac{d}{dx} y(x, \varepsilon)$ der Funktion $y(x, \varepsilon)$; z. B. folgt aus Gl. (1)

$$y'(x, \varepsilon) = -\frac{2}{\pi} \frac{\varepsilon x}{(\varepsilon^2 + x^2)^2}\,. \tag{26}$$

Nun betrachten wir für differenzierbare Funktionen $f(x)$ die Integrale

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, y'(x, \varepsilon)\, dx\,.$$

Ihren Grenzwert $\varepsilon \to 0$ schreiben wir

$$\boxed{\lim_{\varepsilon \to 0} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, y'(x, \varepsilon)\, dx = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta'(x)\, dx} \tag{27}$$

Fig. 90. Verlauf der Funktionen $y'(x, \varepsilon)$, $(\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$

und nennen $\delta'(x)$ die "*Ableitung*" der DIRACschen δ-Funktion. Den Grenzwert berechnen wir durch partielle Integration,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} f(x)\, y(x, \varepsilon)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \lim_{\varepsilon \to 0} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f'(x)\, y(x, \varepsilon)\, dx\,.$$

Wenn $f(x)\, y(x, \varepsilon)$ im Unendlichen verschwindet, ist der erste Term Null. Für den zweiten erhalten wir aus Gl. (9) $-f'(0)$, also *die negative Ableitung der Funktion f an der Stelle* $x = 0$, d. h.

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta'(x)\, dx = -f'(0) \tag{28}$$

oder, wenn wir noch eine Translation um eine Strecke x' vornehmen,

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta'(x - x')\, dx = - f'(x')}\,. \tag{29}$$

Wie in Gl. (9a) kann man die Integration wieder auf eine Umgebung von x' beschränken.

Ein einfaches physikalisches Beispiel für die δ'-Funktion bietet wieder die Elektrostatik: Wegen Gl. (12) erhält man für die Ladungsdichte eines elektrischen Dipols an der Stelle $x = 0$

$$\varrho(x) = q\,\delta(x - dl) - q\,\delta(x) = -p\,\delta'(x) \tag{30}$$

($p = q\,dl$ = Dipolmoment). Aus Gl. (28) folgt $\int \varrho\, dx = 0$ und $\int \varrho x\, dx = p$.

Verfährt man in analoger Weise mit der n-ten Ableitung, so erhält man

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \delta^{(n)}(x - x')\, dx = (-1)^n f^{(n)}(x')}\,. \tag{31}$$

Es folgt

$$\delta^{(n)}(\lambda x) = \frac{\lambda^{-n}}{|\lambda|}\, \delta^{(n)}(x)\,, \tag{32}$$

also insbesondere

$$\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n\, \delta^{(n)}(x)\,. \tag{33}$$

Außerdem gilt

$$x^n\, \delta^{(n)}(x) = (-1)^n\, n!\, \delta(x)\,. \tag{34}$$

§ 4. Die Sprungfunktion

Wir betrachten die Integrale

$$Y(x, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{x} y(x', \varepsilon)\, dx'\,, \tag{35}$$

für die z. B. Gl. (1) ergibt

$$Y(x, \varepsilon) = \frac{1}{\pi}\left(\arctan\frac{x}{\varepsilon} + \frac{\pi}{2}\right).$$

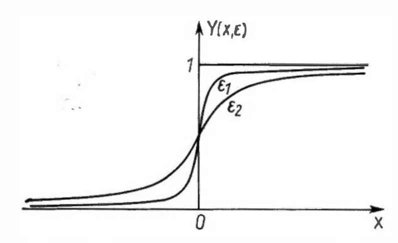


Fig. 91. Verlauf der Funktionen $Y(x, \varepsilon)$, $(\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$

Lassen wir den Parameter ε gegen Null gehen, so nähern sich diese Funktionen dem Einheitssprung (Fig. 91),

$$\theta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} Y(x, \varepsilon) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad x > 0 \\ 0 & \text{für} \quad x < 0. \end{cases} \tag{36}$$

Diese Sprungfunktion können wir als Integral über die δ-Funktion bei variabler oberer Grenze schreiben

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^{x} \delta(x')\,\mathrm{d}x', \tag{37}$$

d. h., die δ-Funktion ist die Ableitung der Sprungfunktion

$$\delta(x) = \frac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x}. \tag{38}$$

Man kann daher in Gl. (9) $\delta(x)\,\mathrm{d}x$ durch $\mathrm{d}\theta(x)$ ersetzen und gelangt damit zu einem STIELTJESschen Integral.

§ 5. Der Hauptwert $\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right)$ und die $\delta_\pm$-Funktionen

Es seien noch einige weitere, verallgemeinerte Funktionen erwähnt, die in der Quantentheorie eine Rolle spielen.

Man definiert

$$\boxed{\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right) = {}''\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{x}{x^2+\varepsilon^2}{}''}, \tag{39}$$

d. h., der Limes $\varepsilon \to 0$ der Integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}\,\mathrm{d}x \tag{40}$$

wird mit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right)\mathrm{d}x \tag{41}$$

bezeichnet. Weil im Integral (40) der Beitrag zwischen den Grenzen $-\varepsilon$ und $+\varepsilon$ mit ε verschwindet, ergibt sich

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right)\mathrm{d}x = \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{+\varepsilon}^{+\infty}\right)\frac{f(x)}{x}\,\mathrm{d}x}. \tag{42}$$

P bedeutet also, daß bei der Integration die Singularität von $1/x$ symmetrisch ausgeschlossen wird (CAUCHY*scher Hauptwert* oder *Prinzipalwert*).

Die Identität

$$\frac{1}{x \pm \mathrm{i}\,\varepsilon} = \frac{x}{x^2+\varepsilon^2} \mp \mathrm{i}\,\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \qquad (\varepsilon > 0) \tag{43}$$

führt wegen der Gln. (1) und (39) auf die Beziehung

$$\boxed{{}''\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{x \pm \mathrm{i}\,\varepsilon}{}'' = \mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp \mathrm{i}\,\pi\,\delta(x)}. \tag{44}$$

Häufig ist es üblich, die Bezeichnung

$$\boxed{\delta_{\pm}(x) = \pm \frac{\mathrm{i}}{2\pi}\text{"}\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{x \pm \mathrm{i}\,\varepsilon}\text{"}} \tag{45}$$

einzuführen, so daß die Gl. (44) übergeht in

$$\delta_{\pm}(x) = \frac{1}{2}\left(\delta(x) \pm \frac{\mathrm{i}}{\pi}\,\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right)\right). \tag{46}$$

Aus der Definition (45) folgt die FOURIER-Darstellung

$$\delta_{\pm}(x) = \frac{1}{2\pi}\text{"}\lim_{\varepsilon\to 0}\int_0^\infty \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}k(x\pm \mathrm{i}\varepsilon)}\,\mathrm{d}k\text{"} = \frac{1}{2\pi}\text{"}\int_0^\infty \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k\text{"} \tag{47}$$

und damit aus Gl. (46)

$$\mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right) = \text{"}\int_0^\infty \sin k\,x\,\mathrm{d}k\text{"}. \tag{48}$$

Die Gleichung

$$y\,x = 1 \tag{49}$$

hat für $x \neq 0$ die Lösung $y = \frac{1}{x}$. Um das Verhalten der Lösung auch für $x = 0$ im Rahmen der verallgemeinerten Funktionen zu gewinnen, erweitern wir x ins Komplexe, $x \to x \pm \mathrm{i}\,\varepsilon$, und erhalten

$$y_{\pm} = \frac{1}{x \pm \mathrm{i}\,\varepsilon}.$$

Die allgemeine Lösung von $y\,x = 1$ ergibt sich, indem man y_+ mit einer Konstanten c_+ und y_- mit c_- multipliziert und dann addiert (mit $\varepsilon \to 0$), wobei

$$c_+ + c_- = 1 \tag{50}$$

sein muß. Setzt man

$$c = \frac{\pi}{\mathrm{i}}(c_+ - c_-), \tag{51}$$

so resultiert im Rahmen der verallgemeinerten Funktionen

$$\boxed{y = \mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right) + c\,\delta(x)}\,. \tag{52}$$

Man verifiziert mit Gl. (23) sofort, daß dies mit beliebigem c tatsächlich Lösung von $y\,x = 1$ ist.

Zweites Kapitel

Funktional und Funktionalableitung[1])

§ 1. Der Begriff des Funktionals

Die Erweiterung der Funktionen mehrerer Veränderlicher

$$F = F(\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_k, \ldots) \tag{1}$$

auf kontinuierlich veränderliches k führt zum Begriff des *Funktionals*. Es handelt sich um eine Vorschrift, nach der einer Funktion $\varphi(k)$ ein bestimmter Wert F zugeordnet wird,

$$F = F[\varphi] \tag{2}$$

(Fig. 92). An Stelle von k schreiben wir künftig x. Für φ und F lassen wir auch komplexe Werte zu.

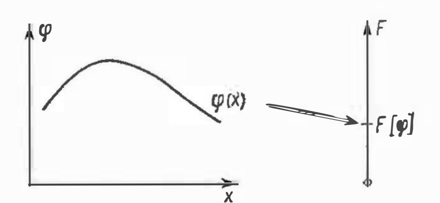


Fig. 92. Zur Definition eines Funktionals

Beispiele:

1. F sei die Fläche, die in einem Intervall $a \leqq x \leqq b$ durch die Funktion $\varphi(x)$ gebildet wird.

$$F[\varphi] = \int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{3}$$

2. Ist $f = f(\varphi)$ eine Funktion von φ, z. B. $f = \varphi^2$, so ist das Integral

$$F[\varphi] = \int_a^b f\big(\varphi(x)\big)\,\mathrm{d}x \tag{4}$$

ebenfalls ein Funktional F von φ.

3. Ist $f = f(\varphi, \varphi')$ eine Funktion von φ und der Ableitung φ', so wird durch das Integral

$$F[\varphi] = \int_a^b f\big(\varphi(x), \varphi'(x)\big)\,\mathrm{d}x \tag{5}$$

wieder ein Funktional F von φ definiert. Man kann also z. B. das Wirkungsintegral (1.2—2) als Funktional der Koordinaten q lesen.

4. Ordnet man einer Funktion $\varphi(x)$ ihren Wert $\varphi(x')$ an einer Stelle x' zu, so ist dadurch ein Funktional $F[\varphi]$ definiert, das sich durch die Diracsche Delta-Funktion $\delta(x' - x)$ darstellen läßt[2])

$$F[\varphi] = \varphi(x') = \int \varphi(x)\,\delta(x' - x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{6}$$

---

[1]) Die Kenntnis dieses Kapitels wird nur in Kap. 1.7 und 4.6 benötigt.

[2]) Dies ist gerade die Definition der δ-Funktion im Rahmen der Distributionstheorie (vgl. Fußnote [1]) S. 383).

Die Definition eines Funktionals läßt sich auch auf Funktionen $\varphi(x, y, \ldots)$ mehrerer unabhängiger Veränderlicher $x, y, \ldots$ und auch auf mehrere unabhängige Funktionen $\varphi_1(x, \ldots)$, $\varphi_2(x, \ldots)$, ...

$$F = F[\varphi_1, \varphi_2, \ldots] \tag{7}$$

erweitern.

§ 2. Die Funktionalableitung

a) Definition

Verändert man die Funktion $\varphi(x)$ um $\Delta\varphi(x)$ (Fig. 93), so wird durch das Funktional der Funktion $\varphi + \Delta\varphi$ ein Wert $F[\varphi + \Delta\varphi] = F + \Delta F$ zugeordnet. Variiert man die Funktion $\varphi(x)$ nur in einer Umgebung dx_0 einer Stelle x_0, so wird F um

$$F[\varphi + \varepsilon(x_0, dx_0)\,\Delta\varphi] - F[\varphi]$$

verändert. Dabei ist

$$\varepsilon(x, x_0, dx_0) \approx \begin{cases} 1 & \text{für } x \text{ in der Umgebung } dx_0 \text{ von } x_0 \\ 0 & \text{für } x \text{ außerhalb } dx_0. \end{cases}$$

Den Grenzwert

$$\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x_0)} = \lim_{dx_0\to 0}\ \lim_{\Delta\varphi\to 0} \frac{F[\varphi + \varepsilon(x_0, dx_0)\,\Delta\varphi] - F[\varphi]}{\Delta\varphi\, dx_0} \tag{8}$$

bezeichnet man, falls er existiert, als *Funktionalableitung* von F nach $\varphi(x_0)$.

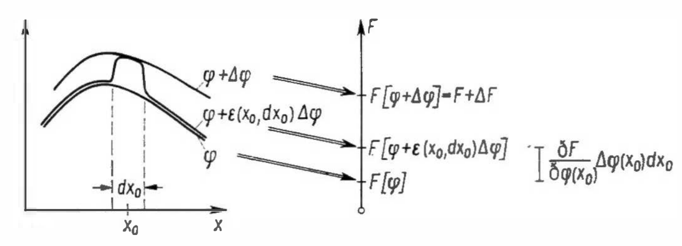


Fig. 93. Zur Definition der Funktionalableitung

Das Differential ΔF zu einer beliebigen differentiellen Veränderung $\Delta\varphi$ erhält man durch Integration über x_0,

$$\Delta F = \int_{x_0} \frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x_0)}\, \Delta\varphi(x_0)\, dx_0. \tag{9}$$

Den Index 0 lassen wir im folgenden der Einfachheit halber weg.

Die Funktionalableitung (8) ist die *Verallgemeinerung der partiellen Ableitung* der Funktion (1)

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi_k}$$

auf kontinuierliche k-Werte. Die Beziehung (9) entspricht dem totalen Differential

$$\Delta F = \sum_k \frac{\partial F}{\partial \varphi_k} \Delta \varphi_k$$

von (1) [statt d ist Δ gesetzt].

b) Einige wichtige Funktionalableitungen

1. Für das Funktional (6)

$$F[\varphi] = \varphi(x')$$

folgt aus Gl. (8) für die Funktionalableitung

$$\frac{\delta \varphi(x')}{\delta \varphi(x)} = \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \lim_{\Delta\varphi \to 0} \frac{\varphi(x') + \varepsilon(x', x, \mathrm{d}x)\,\Delta\varphi - \varphi(x')}{\Delta\varphi\,\mathrm{d}x}$$

$$= \lim_{\mathrm{d}x \to 0} \frac{\varepsilon(x', x, \mathrm{d}x)}{\mathrm{d}x},$$

d. h. nach Gl. (5.1-11$_3$)

$$\boxed{\frac{\delta \varphi(x')}{\delta \varphi(x)} = \delta(x' - x)}\,. \tag{10}$$

Diese Beziehung ist die Verallgemeinerung von $\frac{\partial \varphi_{k'}}{\partial \varphi_k} = \delta_{kk'}$ auf kontinuierliches k.

2. Ist das Funktional die Ableitung φ' an einer Stelle x'

$$F[\varphi] = \varphi'(x'),$$

so folgt durch eine analoge Überlegung

$$\boxed{\frac{\delta \varphi'(x')}{\delta \varphi(x)} = \delta'(x' - x) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\delta(x' - x)}\,. \tag{11}$$

3. Ist $f = f(\varphi)$ eine (differenzierbare) Funktion von φ (z. B. $f = \varphi^2$), so ergibt sich für die Funktionalableitung von

$$F[\varphi] = f(\varphi(x'))$$

aus Gl. (8) wie in der gewöhnlichen Differentialrechnung die *Kettenregel*

$$\frac{\delta f(\varphi(x'))}{\delta \varphi(x)} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\varphi} \frac{\delta \varphi(x')}{\delta \varphi(x)}$$

$$= \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\varphi}\,\delta(x' - x)\,. \tag{12}$$

Entsprechend gilt für die Funktionalableitung von

$$F[\varphi] = f(\varphi(x'), \varphi'(x'))$$

$$\frac{\delta f(\varphi(x'), \varphi'(x'))}{\delta \varphi(x)} = \frac{\partial f}{\partial \varphi} \frac{\delta \varphi(x')}{\delta \varphi(x)} + \frac{\partial f}{\partial \varphi'} \frac{\delta \varphi'(x')}{\delta \varphi(x)}$$

$$= \frac{\partial f}{\partial \varphi}\,\delta(x' - x) - \frac{\partial f}{\partial \varphi'} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\delta(x' - x)\,. \tag{13}$$

4. Ist

$$F[\varphi] = \int f(\varphi(x'))\, \mathrm{d}x',$$

so folgt für die Funktionalableitung

$$\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)} = \int \frac{\delta f(\varphi(x'))}{\delta\varphi(x)}\, \mathrm{d}x'$$

aus Gl. (12) nach Ausführung der Integration über x'

$$\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\varphi}. \tag{14}$$

5. Für das Funktional (5)

$$F[\varphi] = \int f(\varphi(x'), \varphi'(x'))\, \mathrm{d}x'$$

liefert die Beziehung (13) das Ergebnis

$$\boxed{\frac{\delta F[\varphi]}{\delta\varphi(x)} = \frac{\partial f}{\partial\varphi} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial f}{\partial\varphi'}}. \tag{15}$$

Es ist also z. B. die Funktionalableitung des Wirkungsintegrals der LAGRANGEsche Ausdruck.

Die Beziehungen für die Funktionalableitungen lassen sich ohne weiteres auch auf Funktionen $\varphi(x, y, \ldots)$ mehrerer unabhängiger Variabler $x, y, \ldots$ und auch auf mehrere unabhängige Funktionen $\varphi_1(x, \ldots), \varphi_2(x, \ldots), \ldots$ erweitern.

Im Kap. 1.7 werden die Funktionalableitungen im LAGRANGE- und HAMILTON-Formalismus eines Feldes benötigt. Zum Beispiel ist die integrale LAGRANGE-Funktion L eines Feldes ein Funktional der Feldgrößen ψ_i und ihren zeitlichen Ableitungen $\dot{\psi}_i$,

$$L[\psi_i, \dot{\psi}_i] = \int l(\psi_i, \operatorname{grad}\psi_i, \dot{\psi}_i)\, \mathrm{d}^3x.$$

Ersetzt man in den Gleichungen (14) und (15) φ durch ψ_i und $\dot{\psi}_i$ sowie x durch $\mathfrak{r}$, so resultieren die Gleichungen (1.7–74).

Drittes Kapitel

Schrödingersche Störungstheorie

§ 1. Problemstellung

In der SCHRÖDINGERschen Störungstheorie sucht man für einen HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1 \tag{1}$$

die Eigenwerte E_n und Eigenvektoren $|u_n\rangle$,

$$\mathscr{H}\,|u_n\rangle = E_n\,|u_n\rangle, \tag{2}$$

näherungsweise aus jenen des ungestörten HAMILTON-Operators,

$$\mathcal{H}_0 |u_n^0\rangle = E_n^0 |u_n^0\rangle, \tag{3}$$

zu bestimmen. E_n^0 und $|u_n^0\rangle$ seien bekannt. Die Eigenvektoren $|u_n^0\rangle$ sollen ein vollständiges, orthonormiertes Basissystem,

$$\left.\begin{aligned} \langle u_k^0 | u_n^0\rangle &= \delta(k, n) \\ \sum\!\!\!\!\!\!\int_n |u_n^0\rangle \langle u_n^0| \,\mathrm{d}n &= 1, \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

im zugrunde liegenden unitären Raum bilden. Nimmt man an, daß $\mathcal{H}_1$ von einem Zahlenparameter abhängt, $\mathcal{H}_1 = \varepsilon\, h_1$, so kann man sich fragen, wie sich die E_n^0 und $|u_n^0\rangle$ verändern, wenn man den Parameter ε von Null auf einen endlichen, aber kleinen Betrag erhöht (Fig. 94). Es werde vorausgesetzt, daß der Eigenwert, dessen Veränderung untersucht werden soll, *diskret* ist (d. h. aber nicht, daß das gesamte Energiespektrum von $\mathcal{H}_0$ diskret vorausgesetzt wird).

Fig. 94. Zur SCHRÖDINGERschen Störungstheorie

Für die formale Rechnung ist es zweckmäßig, in Gl. (1) einen Parameter λ einzuführen,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1, \tag{1a}$$

der es erlaubt, auf einfache Weise die Störungstheorie nach Potenzen von $\mathcal{H}_1$ zu ordnen. Im Endergebnis wird dann wieder $\lambda = 1$ gesetzt.

§ 2. Nichtentartete Störungstheorie

Zunächst nehmen wir an, daß der zu untersuchende Energieeigenwert E_n^0 nicht entartet sei. Die durch die Störung $\mathcal{H}_1$ veränderten Eigenwerte und Eigenvektoren entwickeln wir nach Potenzen von λ (wodurch eine Entwicklung nach Potenzen von $\mathcal{H}_1$ erreicht wird)[1],

$$\left.\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots \\ |u_n\rangle &= |u_n^0\rangle + \lambda |u_n^1\rangle + \lambda^2 |u_n^2\rangle + \cdots, \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

und setzen sie in die Eigenwertgleichung von $\mathcal{H}$ [Gl. (2)] ein,

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1)(|u_n^0\rangle + \lambda |u_n^1\rangle + \lambda^2 |u_n^2\rangle + \cdots)$$
$$= (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)(|u_n^0\rangle + \lambda |u_n^1\rangle + \lambda^2 |u_n^2\rangle + \cdots).$$

---

[1]) Auf die Konvergenz des Verfahrens soll hier nicht eingegangen werden.

Die verschiedenen Ordnungen der Störungstheorie ergeben sich aus den Koeffizienten von $\lambda^0 = 1, \lambda, \lambda^2, \ldots$

$$\lambda^0: \quad \mathscr{H}_0 | u_n^0\rangle = E_n^0 | u_n^0\rangle, \tag{6^0}$$

$$\lambda^1: \quad \mathscr{H}_0 | u_n^1\rangle + \mathscr{H}_1 | u_n^0\rangle = E_n^0 | u_n^1\rangle + E_n^1 | u_n^0\rangle, \tag{6^1}$$

$$\lambda^2: \quad \mathscr{H}_0 | u_n^2\rangle + \mathscr{H}_1 | u_n^1\rangle = E_n^0 | u_n^2\rangle + E_n^1 | u_n^1\rangle + E_n^2 | u_n^0\rangle, \tag{6^2}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad .$$

Aus der Orthonormierungsbedingung der Eigenvektoren

$$\langle u_k | u_n\rangle = \langle u_k^0 + \lambda u_k^1 + \lambda^2 u_k^2 + \cdots | u_n^0 + \lambda u_n^1 + \lambda^2 u_n^2 + \cdots\rangle = \delta(k, n)$$

ergeben sich die Gleichungen

$$\lambda^0: \quad \langle u_k^0 | u_n^0\rangle = \delta(k, n), \tag{7^0}$$

$$\lambda^1: \quad \langle u_k^0 | u_n^1\rangle + \langle u_k^1 | u_n^0\rangle = 0, \tag{7^1}$$

$$\lambda^2: \quad \langle u_k^0 | u_n^2\rangle + \langle u_k^1 | u_n^1\rangle + \langle u_k^2 | u_n^0\rangle = 0, \tag{7^2}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad .$$

Die Aufgabe besteht nun darin, die Gleichungen (6) und (7) *sukzessiv* zu lösen.

Wir begnügen uns zunächst mit der *ersten Ordnung*, d. h. der Untersuchung der Gleichungen (6^1) und (7^1). [Die Gleichungen (6^0) und (7^0) stellen das ungestörte Eigenwertproblem (3) und (4_1) dar, das wir als gelöst betrachten (Nullte Ordnung).] Wir entwickeln die Vektoren $|u_n^1\rangle$ nach dem vollständigen, normierten Orthogonalsystem der ungestörten Eigenvektoren $|u_{k'}^0\rangle$ [vgl. Gl. (4)],

$$|u_n^1\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} |u_{k'}^0\rangle\, a_{k'n}^1 \, \mathrm{d}k', \tag{8}$$

setzen in Gl. (6^1) ein und erhalten bei Berücksichtigung der ungestörten Eigenwertgleichung

$$\mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} |u_{k'}^0\rangle\, a_{k'n}^1 E_{k'}^0 \, \mathrm{d}k' + \mathscr{H}_1 | u_n^0\rangle = E_n^0 \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} |u_{k'}^0\rangle\, a_{k'n}^1 \, \mathrm{d}k' + E_n^1 | u_n^0\rangle .$$

Nach Multiplikation mit $\langle u_k^0|$ liefert die Orthonormierung (4_1)

$$a_{kn}^1 E_k^0 + \langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle = E_n^0 a_{kn}^1 + E_n^1 \delta(k, n). \tag{9}$$

Für $k \neq n$ erhält man damit die Entwicklungskoeffizienten

$$a_{kn}^1 = \frac{\langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \qquad (k \neq n). \tag{10}$$

Für $k = n$ kürzen sich die ersten Terme auf beiden Seiten von Gl. (9) weg, so daß man für die *Energiestörung in erster Ordnung* erhält[1])

$$\boxed{E_n^1 = \langle u_n^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle} . \tag{11}$$

---

[1]) Weil vorausgesetzt wurde, daß der betrachtete Energieterm E_n^0 diskret ist, wird $\delta(n, n) = \delta_{nn} = 1$.

Sie ist also gegeben durch das Matrixelement von $\mathscr{H}_1$, gebildet mit dem ungestörten Eigenvektor $|u_n^0\rangle$.

Setzt man die Entwicklung (8) in die Normierungsbedingung erster Ordnung (7^1) ein, so erhält man für die Entwicklungskoeffizienten die Forderung

$$a_{kn}^1 + a_{nk}^{1*} = 0\,. \tag{12}$$

Die durch Gl. (10) gegebenen Koeffizienten a_{kn}^1 $(k \neq n)$ erfüllen wegen der HERMITEizität von $\mathscr{H}_1$ diese Gleichungen. Für die Koeffizienten a_{nn}^1, für die wir bisher keine Relation gewonnen haben, ergibt Gl. (12), daß der Realteil von a_{nn}^1 verschwinden muß. Über den Imaginärteil kann man frei verfügen, weil er wegen $e^{i\alpha\lambda} = 1 + i\alpha\lambda$ nur einen willkürlichen Phasenfaktor bedeutet. Man setzt ihn daher der Einfachheit halber Null. Damit haben wir für die *Störung der Energiezustände in erster Näherung* insgesamt das Ergebnis

$$\boxed{\begin{aligned} \langle u_k^0 | u_n^1\rangle &= a_{kn}^1 = \frac{\langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \qquad (k \neq n) \\ \langle u_n^0 | u_n^1\rangle &= a_{nn}^1 = 0 \end{aligned}} \tag{13}$$

erhalten. Wegen des Energienenners genügt es häufig, nur jene a_{kn}^1 zu berücksichtigen, deren k-Werte zu Energien E_k^0 gehören, die dem betrachteten Energiewert E_n^0 benachbart sind.

Um zu den Abweichungen *zweiter Ordnung* zu gelangen, verfährt man mit den Gleichungen (6^2) und (7^2) in analoger Weise. Man findet für die Energiestörung eines diskreten, nicht entarteten Terms E_n^0 den Beitrag zweiter Ordnung

$$\boxed{E_n^2 = \mathop{\mathclap{\sum}\int}_{k(\neq n)} \frac{|\langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}\, dk} \tag{14}$$

und für die Störung der Eigenzustände in zweiter Ordnung die Komponenten

$$\boxed{\begin{aligned} \langle u_k^0 | u_n^2\rangle = a_{kn}^2 &= \mathop{\mathclap{\sum}\int}_{k'(\neq n)} \frac{\langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_{k'}^0\rangle \langle u_{k'}^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle}{(E_n^0 - E_k^0)(E_n^0 - E_{k'}^0)}\, dk' \\ &\quad - \frac{\langle u_k^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle \langle u_n^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle}{(E_n^0 - E_k^0)^2}\,, \qquad (k \neq n)\,, \\ \langle u_n^0 | u_n^2\rangle = a_{nn}^2 &= -\frac{1}{2} \mathop{\mathclap{\sum}\int}_{k'(\neq n)} \frac{|\langle u_{k'}^0 | \mathscr{H}_1 u_n^0\rangle|^2}{(E_n^0 - E_{k'}^0)^2}\, dk' \end{aligned}}\,. \tag{15}$$

§ 3. Entartete Störungstheorie

Ist der ungestörte, diskrete Energieterm E_n^0 *entartet,*

$$\mathscr{H}_0 | u_n^{\nu 0}\rangle = E_n^0 | u_n^{\nu 0}\rangle \qquad (\nu = 1, \ldots, t_n), \tag{16}$$

so gibt es t_n linear unabhängige Eigenvektoren $|u_n^{\nu 0}\rangle$, die den t_n-dimensionalen Eigenraum $\mathfrak{u}_{t_n}$ von E_n^0 aufspannen (vgl. 2.3 § 5). Wir können uns auf orthonormierte Eigenvektoren

$$\langle u_k^{\varkappa 0} | u_n^{\nu 0}\rangle = \delta(k, n)\, \delta^{\varkappa \nu} \tag{17}$$

beschränken. Diese sind nur bis auf unitäre Transformationen in $\mathfrak{u}_{t_n}$ bestimmt.

Es sollen nun wieder die Eigenwerte und Eigenvektoren des gestörten HAMILTON-Operators $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1$,

$$\mathscr{H} | u_n^{\nu}\rangle = E_n^{\nu} | u_n^{\nu}\rangle, \tag{18}$$

näherungsweise aus jenen des ungestörten Problems gewonnen werden. Weil die Entartung des ungestörten Problems im allgemeinen nicht mehr vorliegen wird[1]), müssen die Eigenwerte von $\mathscr{H}$ auch den Index ν besitzen.

Wenn wir einmal annehmen, daß die Vektoren $|u_n^{\nu}\rangle$ bereits gefunden wären, so können wir in ihnen den durch $\mathscr{H}_1 = \varepsilon\, \mathscr{k}_1$ definierten Störparameter ε gegen Null gehen lassen, und wir erhalten (für den Fall, daß E_n^{ν} nicht mehr entartet ist) ganz bestimmte Vektoren $|\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle$ im Eigenraum $\mathfrak{u}_{t_n}$ von $\mathscr{H}_0$,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} | u_n^{\nu}\rangle = | \hat{u}_n^{\nu 0}\rangle. \tag{19}$$

Wenn wir jetzt umgekehrt versuchen wollen, aus dem ungestörten Eigenwertproblem die Eigenvektoren $|u_n^{\nu}\rangle$ näherungsweise zu bestimmen, so müssen wir im Eigenraum $\mathfrak{u}_{t_n}$ gerade diese „*der Störung* $\mathscr{H}_1$ *angepaßten*" Eigenvektoren $|\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle$ aus der Vielzahl der Eigenvektoren von $\mathscr{H}_0$ aufsuchen.

Für die Entwicklung nach der Störung setzen wir daher

$$\begin{aligned} E_n^{\nu} &= E_n^0 + \lambda E_n^{\nu 1} + \cdots, \\ |u_n^{\nu}\rangle &= |\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle + \lambda | u_n^{\nu 1}\rangle + \cdots \end{aligned} \tag{20}$$

und erhalten an Stelle von Gl. (6)

$$\lambda^0: \quad \mathscr{H}_0 | \hat{u}_n^{\nu 0}\rangle = E_n^0 | \hat{u}_n^{\nu 0}\rangle \tag{21^0}$$

$$\lambda^1: \quad \mathscr{H}_0 | u_n^{\nu 1}\rangle + \mathscr{H}_1 | \hat{u}_n^{\nu 0}\rangle = E_n^0 | u_n^{\nu 1}\rangle + E_n^{\nu 1} | \hat{u}_n^{\nu 0}\rangle \tag{21^1}$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

[1]) Mit Hilfe der gruppentheoretischen Methoden (vgl. 3.6 § 7 u. Kap. 5.4) ist man imstande, allgemeine Aussagen über die Aufhebung der Entartung durch eine symmetrievermindernde Störung zu machen.

Die der Störung angepaßten Eigenvektoren $|\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle$ nullter Ordnung entwickeln wir nach irgendwelchen orthonormierten Eigenvektoren $|u_n^{\nu' 0}\rangle$ des Eigenraums $\mathfrak{u}_{t_n}$,

$$|\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle = \sum_{\nu'=1}^{t_n} |u_n^{\nu' 0}\rangle A_n^{\nu'\nu}, \tag{22}$$

und die Abweichung erster Ordnung $|u_n^{\nu 1}\rangle$ nach dem vollständigen, orthonormierten System *aller* ungestörten Eigenvektoren $|u_{k'}^{\varkappa' 0}\rangle$,

$$|u_n^{\nu 1}\rangle = \underset{\varkappa', k'}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} |u_{k'}^{\varkappa' 0}\rangle\, a_{k'n}^{\varkappa'\nu 1}\, \mathrm{d}k' \tag{23}$$

[analog Gl. (8)]. Nach Einsetzen in Gl. (21[1]) erhalten wir nach Multiplikation mit $\langle u_k^{\varkappa 0}|$ aus der Orthonormierung (17)

$$\sum_{\nu'=1}^{t_n} \left(\langle u_k^{\varkappa 0}|\mathscr{H}_1 u_n^{\nu' 0}\rangle - E_n^{\nu 1}\,\delta^{\varkappa\nu'}\,\delta(k, n)\right) A_n^{\nu'\nu} = (E_n^0 - E_k^0)\, a_{kn}^{\varkappa\nu 1}. \tag{24}$$

Diese Gleichungen sind die Verallgemeinerung von Gl. (9) auf das entartete Problem. Für $k = n$ reduziert sich diese Beziehung wegen $\delta(n, n) = \delta_{nn} = 1$ auf

$$\sum_{\nu'=1}^{t_n} (\langle u_n^{\varkappa 0}|\mathscr{H}_1 u_n^{\nu' 0}\rangle - E_n^{\nu 1}\,\delta^{\varkappa\nu'})\, A_n^{\nu'\nu} = 0. \tag{25}$$

Dieses homogene Gleichungssystem für die Größen $A_n^{\nu'\nu}$ hat nur dann von Null verschiedene Lösungen, wenn die Determinante der Koeffizienten verschwindet,

$$\boxed{\det (\langle u_n^{\varkappa 0}|\mathscr{H}_1 u_n^{\nu' 0}\rangle - E_n^{\nu 1}\,\delta^{\varkappa\nu'}) = 0} \qquad (\varkappa, \nu' = 1, \ldots, t_n). \tag{26}$$

Die Matrixelemente der Störung $\mathscr{H}_1$, gebildet mit den ungestörten Eigenvektoren, bestimmen daher — in Erweiterung von Gl. (11) — die Energiestörung erster Ordnung: Die Säkulardeterminante (26) führt auf eine algebraische Gleichung vom Grad t_n, deren Nullstellen

$$E_n^{11}, E_n^{21}, \ldots, E_n^{\nu 1}, \ldots, E_n^{t_n 1} \tag{27}$$

die *Aufspaltung der entarteten Energie E_n^0 in erster Ordnung* liefert (vgl. als Beispiel die Aufhebung der Austauschentartung in 4.4 § 1). Fallen einige der Lösungen (27) zusammen, so bleibt die Entartung (wenigstens in erster Ordnung) teilweise bestehen (vgl. Fußnote [1]) S. 398).

Die der Störung *angepaßten Eigenvektoren nullter Ordnung* $|\hat{u}_n^{\nu 0}\rangle$ ergeben sich, indem man aus den Gl. (25) die Entwicklungskoeffizienten $A_n^{\nu'\nu}$ berechnet. Die Koeffizienten $a_{kn}^{\varkappa\nu 1}$, die die *Störung der Eigenvektoren in erster Ordnung* bestimmen, erhält man schließlich aus den Gleichungen (24).

Viertes Kapitel

Gruppen und ihre Darstellungen[1])

In diesem Kapitel soll über Gruppen- und Darstellungstheorie insoweit referiert werden, als es für das Verständnis einiger Abschnitte dieses Buches nötig ist. Für ein genaueres Studium dieser Fragen möge ein Lehrbuch der Gruppentheorie, in dem sich auch die Beweise der angegebenen Sätze finden, benützt werden (z. B. M. HAMMERMESH, Group theory and its application to physical problems, London 1962).

§ 1. Beispiele von Symmetriegruppen

Nahezu jedes physikalische Problem gestattet bestimmte Symmetrietransformationen. Diese Transformationen haben — unabhängig von ihrer speziellen Bedeutung — die Eigenschaften einer *Gruppe.* Bevor wir deren mathematische Eigenschaften kennenlernen (§ 2), seien einige wichtige Beispiele von Symmetriegruppen aufgeführt.

1. Die *Translationsgruppe* $T(3)$ = Gesamtheit aller Translationen im dreidimensionalen Raum. Diese ist Symmetriegruppe eines freien Teilchens, weil wegen der Homogenität des Raumes keine Stelle des Raumes ausgezeichnet ist.

2. Die *Drehgruppe* $O(3)$ = Gesamtheit aller dreidimensionalen Drehungen um einen festen Punkt (dreidimensionale, orthogonale Transformationen mit der Determinante $+1$). Ein Potential $V(r)$ (4.3 § 3), das nur vom Abstand r, nicht aber von den Polarwinkeln ϑ, φ abhängt, ist invariant gegenüber $O(3)$.

3. Die *Inversionsgruppe* I, welche die Inversion $\mathfrak{r} \to -\mathfrak{r}$ am Nullpunkt beschreibt. Verbindet man jede Drehung aus $O(3)$ mit einer Inversion, so gelangt man zu den Drehinversionen. Zusammen mit den Drehungen erhält man die *Drehinversionsgruppe* $O'(3)$, wofür man auch schreibt $O(3) \times I$. Sie besteht aus allen dreidimensionalen orthogonalen Transformationen mit Determinante ± 1. Das in 2. erwähnte Potential $V(r)$ ist invariant gegenüber $O'(3)$.

4. Die *Drehgruppe* $O(2) \equiv C_\infty$ = Gesamtheit aller ebenen Drehungen um einen festen Punkt (Axialsymmetrie). Bringt man z. B. ein Atom in ein homogenes Magnetfeld, so verbleiben nur jene Drehungen aus $O(3)$ Symmetrietransformationen, welche um die ausgezeichnete Richtung erfolgen (vgl. Aufg. 80).

5. Die *zyklischen Gruppen* C_n: Sie enthalten n Drehungen mit dem Winkel $2\pi/n$ um eine feste Achse („n-zählige Drehachse“). Die *Diedergruppen* D_n: Neben einer n-zähligen Drehachse gibt es noch n zweizählige Achsen, die alle auf der n-zähligen Achse senkrecht stehen (vgl. Fig. 95). Die Operationen der Gruppen C_n bzw. D_n lassen sich auch noch mit der Inversion kombinieren. In der Mole-

[1]) Dieses Kapitel kann beim ersten Studium übergangen werden. Für Kap. 3.6 ist seine Kenntnis erforderlich.

külphysik kann man solche diskrete *Punktgruppen* verwenden, um anzugeben, durch welche Operationen ein Molekül in sich übergeht. In der Festkörperphysik sind sie wichtig für die Angabe jener Symmetrieoperationen eines Kristalls, bei denen eine bestimmte Lage im Kristall (Ion) nicht verändert wird (Kristallklassen).

6. Die *Translationen* $T_{\mathfrak{t}}$ = Gesamtheit aller Translationen um diskrete Strecken $\mathfrak{t} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathfrak{a}_i$ (n_i = ganz). Diese Symmetrieoperationen führen einen Kristall in sich über, wenn die Vektoren $\mathfrak{a}_i$ die primitiven Gittervektoren bedeuten. Betrachtet man neben diesen Translationen noch die Drehungen, Inversionen und die daraus zusammengesetzten Operationen (z. B. Gleitspiegelungen), welche einen Kristall ebenfalls in sich überführen, so gelangt man zur *Raumgruppe R* des Kristalls.

7. Die *Permutationsgruppen* S_n, deren Elemente aus den $n!$ Permutationen von n Dingen bestehen. Liegen n identische Teilchen vor, so bilden die $n!$ Permutationen der Teilchen eine Symmetriegruppe (vgl. die Kap. 4.4 und 4.5).

8. Die relativistischen Feldgleichungen müssen invariant sein gegenüber den LORENTZ-*Transformationen* $L(4)$ im vierdimensionalen Raum-Zeit-Kontinuum. Eine Klassifikation der verschiedenen Elementarteilchen versucht man heute durch Betrachtung von *unitär-unimodularen Gruppen* $SU(n)$, bestehend aus den n-dimensionalen unitären Transformationen mit Determinante 1.

§ 2. Grundbegriffe der Gruppentheorie

a) Die Gruppenaxiome

Eine Gruppe $\mathfrak{G}$ besteht aus einer Anzahl von verschiedenen, abstrakten Elementen,

$$\mathfrak{G} = (e, g_1, g_2, \ldots, g_i, \ldots), \tag{1}$$

zwischen denen eine Verknüpfungsvorschrift besteht, die man formal als „Produkt" der Elemente schreibt, z. B. $g_i g_k$. Die Elemente bilden eine Gruppe, falls für *alle* Elemente g_i die folgenden Gruppenaxiome erfüllt sind:

1. Die Verknüpfung zweier Elemente g_i und g_k ist wieder ein Element der Gruppe

$$g_i\, g_k \in \mathfrak{G}. \tag{2}$$

2. Es gilt das Assoziativgesetz für die Verknüpfung dreier Elemente

$$(g_i g_k)\, g_l = g_i (g_k g_l) = g_i\, g_k\, g_l. \tag{3}$$

3. Es existiert ein Element e (Einselement), mit der Eigenschaft

$$e\, g_i = g_i. \tag{4}$$

4. Es existiert zu jedem Element g_i ein inverses Element g_i^{-1} mit der Eigenschaft

$$g_i^{-1} g_i = e. \tag{5}$$

Aus diesen Axiomen folgen unmittelbar einige elementare Rechenregeln, wie $g_i e = g_i$, $g_i g_i^{-1} = e$, $(g_i^{-1})^{-1} = g_i$, $(g_i g_k)^{-1} = g_k^{-1} g_i^{-1}$ (Reihenfolge!).

Identifiziert man die Elemente mit den Transformationen, wie sie in § 1 betrachtet wurden, so stellt die Verknüpfungsvorschrift die Nacheinanderausführung zweier Transformationen g_k und g_i dar, was wiederum zu einer Transformation $g_i g_k$ der Gruppe führt. Das Einselement e bedeutet das Ausführen keiner Transformation, das Inverse g_i^{-1} das Rückgängigmachen der Transformation g_i.

Von den Gruppenelementen verlangt man im allgemeinen nicht, daß die Verknüpfungen $g_i g_k$ und $g_k g_i$ zum gleichen Gruppenelement führen,

$$g_i g_k \neq g_k g_i, \tag{6}$$

die Gruppenelemente müssen nicht vertauschbar sein. Wir kommen überein, daß wir unter $g_i g_k$ jenes Element verstehen wollen, das entsteht, wenn wir erst die Operation g_k und dann die Operation g_i ausführen, d. h., *wir lesen das Produkt von rechts nach links.* — Ist die Kommutativität für alle Elemente einer Gruppe gewährleistet, dann heißt sie ABELsch. Beispiele von ABELschen Gruppen sind $T(3)$, C_n und C_∞. Die Gruppe $O(3)$ hingegen ist nicht ABELsch, man sieht nämlich geometrisch sofort ein, daß das Ergebnis zweier Drehungen um verschiedene Achsen von der Reihenfolge abhängt.

b) Gruppenordnung. Kontinuierliche Gruppen

Die Anzahl N der Gruppenelemente heißt Ordnung der Gruppe. Neben den Gruppen endlicher Ordnung gibt es Gruppen mit unendlich vielen Gruppenelementen. Ein Beispiel einer Gruppe mit abzählbar unendlich vielen Elementen ist T_t. Von den im § 1 angegebenen Gruppen besitzen $T(3)$, $O(3)$, $O(2)$, $L(4)$, $SU(n)$ kontinuierlich viele Gruppenelemente. Lassen sich die Elemente einer kontinuierlichen Gruppe durch ϱ stetig veränderliche, reelle Parameter $\alpha_1, \ldots, \alpha_\varrho$ eindeutig kennzeichnen,

$$g = g(\alpha_1, \ldots, \alpha_\varrho), \tag{7}$$

so heißt die Gruppe eine *ϱ-parametrige kontinuierliche Gruppe.* $O(3)$ ist ein Beispiel einer 3-parametrigen kontinuierlichen Gruppe, weil sich die dreidimensionalen Drehungen durch drei EULERsche Winkel [vgl. Gl. (18)] darstellen lassen. Wird die identische Transformation durch $e = e(\alpha_1^0, \ldots, \alpha_\varrho^0)$ beschrieben, so nennt man jene Elemente, die sich durch infinitesimale Parameteränderungen $\delta\alpha_1, \ldots, \delta\alpha_\varrho$ von e unterscheiden, *infinitesimale* Gruppenelemente

$$g(\alpha_1^0 + \delta\alpha_1, \ldots, \alpha_\varrho^0 + \delta\alpha_\varrho). \tag{8}$$

Viele der im folgenden angegebenen Sätze über endliche Gruppen lassen sich unter bestimmten topologischen Voraussetzungen auch auf kontinuierliche

Gruppen erweitern, wenn man an Stelle der Summen über die Gruppenelemente entsprechende Integrale einführt.

c) Gruppentafel

Die gesamten Eigenschaften einer endlichen Gruppe kann man am besten an einer *Gruppentafel* ablesen, in der die Multiplikationsergebnisse zwischen allen Gruppenelementen aufgeführt sind. Zwei Transformationsgruppen, deren Gruppenelemente dieselbe Gruppentafel besitzen, heißen *isomorph* ($\leftrightarrow$)[1]. Es handelt sich dann um zwei verschiedene Realisierungen derselben abstrakten Gruppe $\mathfrak{G}$.

1. *Beispiel: Die Inversionsgruppe I.* Weil die zweimalige Ausführung einer Inversion i wieder zur Einheitstransformation führt, $i^2 = e$, hat die Inversionsgruppe $I = (e, i)$ die Gruppentafel

	e	i
e	e	i
i	i	e

(9)

Alle Gruppen der Ordnung $N = 2$ sind isomorph zu I. Ein Beispiel dazu ist die *Permutationsgruppe* S_2 (vgl. 4.4 § 2a), deren Elemente die Permutationen zweier Dinge 1 und 2 sind. Bezeichnen wir mit

$$\left.\begin{array}{l} e = (1)(2) \text{ die Vertauschung } 1 \to 1,\ 2 \to 2 \\ \text{(d. h. keine Vertauschung)} \\ \text{und mit} \\ a = (12) \text{ die Vertauschung } 1 \to 2,\ 2 \to 1, \end{array}\right\} \quad (10)$$

so sieht man sofort, daß $a^2 = e$ gilt. Die Gruppentafel der Permutationsgruppe S_2 erhält man also aus der von I, indem man einfach das Zeichen i durch a ersetzt. Obwohl die Elemente von I und S völlig verschiedene Bedeutung haben, sind diese Gruppen isomorph, d. h. sie stellen dieselbe abstrakte Gruppe $\mathfrak{G}$ dar.

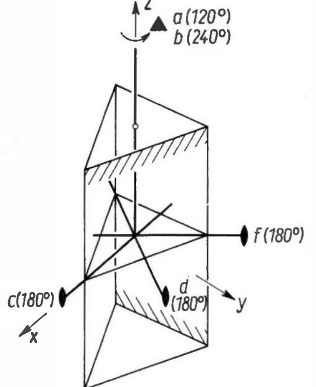


Fig. 95. Die Symmetrieelemente der Gruppe D_3: Drehungen a bis f. Bei der Operation $ca = f$ gehen die schraffierten Ebenen ineinander über

2. *Beispiel: Die Diedergruppe* D_3 (Fig. 95). Die dreizählige Drehachse erlaubt die Drehungen a um 120° und b um 240°. Die drei zur trigonalen Achse senkrechten zweizähligen Drehachsen c, d, f stellen jeweils Drehungen um 180° dar. Mit der Einheit e (Drehung 0°) ergeben sich somit $N = 6$ Drehungen der Gruppe D_3. Man überzeugt sich leicht, daß die Gruppenaxiome erfüllt sind. Wir verfolgen die Stellung des in Fig. 95 eingezeichneten gleichseitigen Prismas bei Ausführung der Drehoperationen (die Drehachsen halten wir raumfest): Zum Beispiel ergibt sich, wenn man zuerst a und dann c ausführt, dieselbe Stellung wie nach Ausführung der Drehung f, d. h. $ca = f$. Die umgekehrte Reihenfolge ergibt

[1]) Eine umkehrbar eindeutige Zuordnung von Elementen, bei der die Rechenregeln erhalten bleiben, nennt man einen Isomorphismus.

indes $ac = d$, d. h., die Gruppe D_3 ist nicht ABELsch. Die gesamte Gruppentafel lautet

rechter Faktor (1. Operation)

linker Faktor (2. Operation)

	e	a	b	c	d	f	x^{-1}
e	e	a	b	c	d	f	e
a	a	b	e	d	f	c	b
b	b	e	a	f	c	d	a
c	c	f	d	e	b	a	c
d	d	c	f	a	e	b	d
f	f	d	c	b	a	e	f

(11)

Es ist ersichtlich, daß in der Gruppentafel jedes Element der Gruppe in jeder Zeile und Spalte genau einmal vorkommt; diese Eigenschaft gilt ganz allgemein für jede Gruppe. — In der letzten Spalte von (11) sind die inversen Elemente angegeben.

Die Diedergruppe D_3 ist isomorph zur *Permutationsgruppe* S_3. Die $3! = 6$ Permutationen erfüllen die Gruppentafel (11), wenn man setzt

$$\begin{aligned}
e &= (1)\,(2)\,(3), && \text{d. h. die Vertauschungen } 1 \to 1,\quad 2 \to 2,\quad 3 \to 3,\\
a &= (1\,2\,3), && \text{d. h. die Vertauschungen } 1 \to 2 \to 3 \to 1,\\
b &= (1\,3\,2), && \text{d. h. die Vertauschungen } 1 \to 3 \to 2 \to 1,\\
c &= (1\,2)\,(3), && \text{d. h. die Vertauschungen } 1 \to 2 \to 1,\quad 3 \to 3,\\
d &= (1\,3)\,(2), && \text{d. h. die Vertauschungen } 1 \to 3 \to 1,\quad 2 \to 2,\\
f &= (2\,3)\,(1), && \text{d. h. die Vertauschungen } 2 \to 3 \to 2,\quad 1 \to 1.
\end{aligned} \tag{12}$$

Es ist nämlich z. B. $c \cdot a = (12)\,(3) \cdot (123) = (1)\,(23) = f$.

Greift man aus einer Gruppe $\mathfrak{G}$ eine Teilmenge von Elementen heraus, welche für sich bereits alle Gruppenaxiome erfüllen, so nennt man diese Elemente eine *Untergruppe* $\mathfrak{g}$ ($\mathfrak{g}$ muß damit stets e enthalten).

Aus der Gruppentafel von D_3 ersieht man z. B., daß die Elemente (e, a, b) der dreizähligen Drehachse eine Untergruppe bilden; ebenso bilden die Elemente der zweizähligen Drehachsen (e, c), (e, d) und (e, f) Untergruppen: Die zyklischen Gruppen C_3 und C_2 sind Untergruppen von D_3.

d) Klasseneinteilung

Greift man irgendein Element r einer Gruppe $\mathfrak{G}$ heraus und bildet damit die Elemente $x^{-1}rx$, wobei x alle Elemente der Gruppe durchläuft, so bildet die Gesamtheit der verschiedenen, zu r „konjugierten" Elemente $x^{-1}rx = g_{1r}, g_{2r}, \ldots$ eine *Klasse*

$$\mathfrak{C}_r = (g_{1r}, g_{2r}, \ldots, g_{h_r r}). \tag{13}$$

h_r ist die Anzahl der in $\mathfrak{C}_r$ vereinten Elemente; sie ist ein Teiler der Gruppenordnung N. Elemente derselben Klasse sind zueinander konjugiert, Elemente verschiedener Klassen nicht. Jedes Element von $\mathfrak{G}$ gehört genau einer Klasse an, man erhält eine *Klasseneinteilung* der Gruppe. Die Anzahl der verschiedenen Klassen sei c. Bei ABELschen Gruppen ist jedes Element eine Klasse für sich, d. h., alle $h_r = 1$ und $c = N$.

Im Beispiel der nicht ABELschen Gruppe $D_3 \leftrightarrow S_3$ ergeben sich nach der Gruppentafel (11) die Klassen

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{C}_e &= & &= e & &\equiv \mathfrak{C}_1 \quad (h_1 = 1) \\ \mathfrak{C}_a &= \mathfrak{C}_b & &= (a, b) & &\equiv \mathfrak{C}_2 \quad (h_2 = 2) \\ \mathfrak{C}_c &= \mathfrak{C}_d = \mathfrak{C}_f & &= (c, d, f) & &\equiv \mathfrak{C}_3 \quad (h_3 = 3)\,. \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

Es ist also $c = 3$.

§ 3. Die Darstellungen einer Gruppe

a) Definition einer Darstellung ${}^t\Gamma$

Für die quantentheoretische Anwendung der Gruppentheorie sind die Darstellungen einer abstrakten Gruppe durch quadratische Matrizen von Bedeutung. Eine solche *Darstellung* ${}^t\Gamma$ erhält man, wenn man jedem Element g einer Gruppe $\mathfrak{G}$ eine quadratische Matrix $\boldsymbol{D}(g)$ (mit von Null verschiedener Determinante) zuordnet,

$$\boxed{g \to \boldsymbol{D}(g) = \left(D^{\mu'\mu}(g)\right)} \qquad (\mu, \mu' = 1, \ldots, t). \tag{15}$$

Die Matrixelemente $D^{\mu'\mu}(g)$ können komplexe Zahlen sein. Alle Matrizen $\boldsymbol{D}(g)$ innerhalb einer Darstellung haben denselben Grad t, d. h. die gleiche Anzahl von Zeilen. Man nennt t die *Dimension* der Darstellung ${}^t\Gamma$. Damit die Matrizen tatsächlich die Gruppe „darstellen", müssen bei der Zuordnung (15) alle Relationen der Gruppe erhalten bleiben. Wir verlangen also, daß dem Produkt zweier Gruppenelemente das Produkt der zugeordneten Matrizen zugeordnet ist,

$$\boxed{g_i g_k \to \begin{aligned} \boldsymbol{D}(g_i g_k) &= \boldsymbol{D}(g_i)\, \boldsymbol{D}(g_k), \text{ d. h.} \\ D^{\mu'\mu}(g_i g_k) &= \sum_{\bar{\mu}=1}^{t} D^{\mu'\bar{\mu}}(g_i)\, D^{\bar{\mu}\mu}(g_k) \end{aligned}}\,. \tag{16}$$

Dem Einselement e wird die Einheitsmatrix $\boldsymbol{1} = (\delta^{\mu'\mu})$, dem Element g^{-1} die inverse Matrix $\boldsymbol{D}^{-1}(g)$ zugeordnet. ($\boldsymbol{D}^{-1}$ existiert, da wir vorausgesetzt haben, daß die Determinante der Matrizen nicht verschwindet.) Weil außerdem die Matrizenmultiplikation assoziativ (aber i. allg. nicht kommutativ) ist, sind die Relationen zwischen den Gruppenelementen durch Matrizen erfüllbar. Die Dar-

stellung $g \to \boldsymbol{D}(g)$ ist eine *homomorphe Zuordnung,* d. h., sie braucht nicht umkehrbar eindeutig zu sein, es kann vielmehr verschiedenen Gruppenelementen dieselbe Matrix zugeordnet sein.

Die einfachsten Darstellungen sind die eindimensionalen, bei denen also jedes Element der Gruppe durch eine (komplexe) Zahl dargestellt wird, so daß diese Zahlen die Gruppentafel erfüllen. Wir können sofort eine triviale eindimensionale Darstellung angeben, die jede Gruppe besitzt, nämlich jene, bei der jedem Gruppenelement die Zahl 1 zugeordnet wird. Diese Darstellung nennt man *identische Darstellung* ${}^1\Gamma_1$.

Beispiele:

1. Darstellungen der *Inversionsgruppe I* sind z. B.

	$\boldsymbol{D}(e) = \boldsymbol{1}$	$\boldsymbol{D}(i)$
${}^1\Gamma_1$	1	1
${}^1\Gamma_2$	1	-1
${}^2\Gamma$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$
${}^3\Gamma$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\pm1&0&0\\0&\pm1&0\\0&0&\pm1\end{pmatrix}$

(17)

weil $\boldsymbol{D}^2(i) = \boldsymbol{D}(e) = \boldsymbol{1}$ gilt.

2. Eine dreidimensionale Darstellung ${}^3\Gamma$ der Gruppe $D_3 \leftrightarrow S_3$ erhält man direkt aus der geometrischen Bedeutung als Diedergruppe (Fig. 95), wenn man berücksichtigt, daß sich jede Drehung im dreidimensionalen Raum mit Hilfe Eulerscher Winkel α, β, γ durch die Transformationsmatrix

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \tag{18}$$

beschreiben läßt. Die Drehung wird dabei zusammengesetzt aus einer Drehung mit γ um die z-Achse, dann mit β um die (alte) y-Achse und schließlich mit α wieder um die z-Achse. Für die Drehungen a bis f ergeben sich die Matrizen

$$
{}^3\Gamma\left\{\begin{aligned}
&\boldsymbol{D}(e) = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(a) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}&0\\ \sqrt{3}&-1&0\\0&0&2\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(b) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}&0\\ -\sqrt{3}&-1&0\\0&0&2\end{pmatrix},\\
&\boldsymbol{D}(c) = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(d) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&\sqrt{3}&0\\ \sqrt{3}&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{D}(f) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1&-\sqrt{3}&0\\ -\sqrt{3}&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}.
\end{aligned}\right\} \tag{19}
$$

b) Äquivalente Darstellungen

Gibt man sich irgendeine t-dimensionale Matrix S vor (die eine Inverse S^{-1} besitzt) und bildet man damit aus allen Darstellungsmatrizen $D(g)$ einer Darstellung ${}^t\Gamma$ die Matrizen

$$\boxed{\bar{D}(g) = S^{-1} D(g)\, S}, \tag{20}$$

so erhält man eine zu ${}^t\Gamma$ isomorphe Darstellung ${}^t\bar{\Gamma}$, weil bei der Ähnlichkeitstransformation (20) die Relationen erhalten bleiben; z. B. ist

$$\begin{aligned}\bar{D}(g_i g_k) &= S^{-1} D(g_i g_k)\, S = S^{-1} D(g_i)\, D(g_k)\, S \\ &= S^{-1} D(g_i)\, S S^{-1} D(g_k)\, S = \bar{D}(g_i)\, \bar{D}(g_k)\,.\end{aligned}$$

Alle durch Ähnlichkeitstransformationen auseinander hervorgehenden isomorphen Darstellungen heißen zueinander *äquivalent*. Man kann beweisen, daß es bei endlichen Gruppen und bei einer bestimmten Klasse unendlicher Gruppen (den kompakten LIE-Gruppen) immer möglich ist, durch eine geeignete Transformation S alle Matrizen einer Darstellung *unitär* zu machen, so daß gilt

$$D^\dagger(g)\, D(g) = 1\,. \tag{21}$$

Transformiert man z. B. die Darstellung ${}^2\Gamma$ [Gl. (17)] der Gruppe I mit

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix},$$

so erhält man die äquivalente Darstellung

$${}^2\bar{\Gamma}: \quad \bar{D}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = D(e), \quad \bar{D}(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{$\overline{17}$}$$

Es gilt natürlich wieder $\bar{D}(i)^2 = \bar{D}(e) = 1$.

c) Der Darstellungsraum $\mathfrak{u}_t$

Eine t-dimensionale Darstellung einer Gruppe läßt sich als *Vektorzuordnung* in einem t-dimensionalen unitären Raum $\mathfrak{u}_t$ interpretieren. Betrachten wir nämlich t Vektoren $|u^\mu\rangle$ ($\mu = 1, \ldots, t$) in $\mathfrak{u}_t$, so werden durch jede Darstellungsmatrix $D^{\mu'\mu}(g)$ gerade t neue Vektoren erzeugt, die wir, um den Anschluß zur Quantentheorie zu erhalten, mit $|\mathscr{D}(g)\, u^\mu\rangle$ bezeichnen,

$$\boxed{|u^\mu\rangle \xrightarrow{g} |\mathscr{D}(g)\, u^\mu\rangle = \sum_{\mu'=1}^{t} |u^{\mu'}\rangle\, D^{\mu'\mu}(g)}\,. \tag{22}$$

Sind insbesondere die Vektoren $|u^\mu\rangle$ orthonormiert, so sind es auch die entstehenden Vektoren $|\mathscr{D}(g)\, u^\mu\rangle$, wenn wir uns auf unitäre Matrizen $D(g)$ beschränken. $\mathscr{D}(g)$ sind dann unitäre Operatoren, die die Gruppenrelationen erfüllen.

Durch Gl. (22) ist der Zusammenhang mit Gl. (3.6–43) hergestellt: *Die Eigenräume eines Operators $\mathscr{H}$, der die Symmetriegruppe $\mathfrak{G}$ besitzt, sind Darstellungsräume von $\mathfrak{G}$.*

Der Übergang zu einer äquivalenten Darstellung bedeutet in $\mathfrak{u}_t$, daß man zu anderen Vektoren

$$
\begin{aligned}
|\bar{u}^{\mu}\rangle &= \sum_{\mu'} |u^{\mu'}\rangle\, S^{\mu'\mu}, \\
|\mathscr{D}(g)\,\bar{u}^{\mu}\rangle &= \sum_{\mu'} |\mathscr{D}(g)\, u^{\mu'}\rangle\, S^{\mu'\mu}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

übergeht. Die Zuordnung zwischen den neuen Vektoren erfolgt durch die äquivalenten Darstellungsmatrizen $\bar{D}(g) = S^{-1}\, D(g)\, S$,

$$
|\bar{u}^{\mu}\rangle \xrightarrow{g} |\mathscr{D}(g)\,\bar{u}^{\mu}\rangle = \sum_{\mu'} |\bar{u}^{\mu'}\rangle\, \bar{D}^{\mu'\mu}(g)\,. \tag{24}
$$

§ 4. Reduzible und irreduzible Darstellungen

a) Definition

Hat man einige Darstellungen Γ_1, Γ_2, ... von $\mathfrak{G}$ vorliegen, so kann man aus diesen eine neue Darstellung von $\mathfrak{G}$ gewinnen, indem man mit den Darstellungsmatrizen $D_1(g)$, $D_2(g)$, ... für jedes g eine neue Matrix der *Kästchengestalt*

$$
D(g) = \begin{pmatrix} D_1(g) & & 0 \\ & D_2(g) & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix} \tag{25}
$$

bildet. Die Gesamtheit dieser Matrizen ist wieder eine Darstellung Γ von $\mathfrak{G}$, weil bei der Multiplikation wegen der eingefügten Nullen nur jene Teilmatrizen D_k, die auf gleicher Höhe stehen, miteinander multipliziert werden. Für die auf diese Weise entstehende Darstellung schreiben wir symbolisch $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \cdots$, oder wenn eine Darstellung Γ_k gerade q_k mal vorkommt, $\Gamma = \sum_k q_k\, \Gamma_k$. Die Dimension von Γ ist dann $t = \sum_k q_k\, t_k$. Die Kästchengestalt der Matrizen (25) geht natürlich verloren, wenn man durch eine t-dimensionale Transformation S zu einer äquivalenten Darstellung übergeht.

Man kann sich nun umgekehrt fragen, ob es für eine beliebige vorgegebene Darstellung Γ möglich ist, eine solche Transformation S zu finden, so daß man eine äquivalente Darstellung erhält, in der die Darstellungsmatrizen $D(g)$

eine Kästchengestalt (25) annehmen, die für *alle* Matrizen $\boldsymbol{D}(g)$ gleich ist. Existiert keine solche Matrix $\boldsymbol{S}$, so nennt man die vorgegebene Darstellung *irreduzibel*, gibt es hingegen ein solches $\boldsymbol{S}$, so heißt die Darstellung *reduzibel. Eine reduzible Darstellung läßt sich durch eine Transformation* $\boldsymbol{S}$ *in irreduzible Darstellungen zerlegen.* Die irreduziblen Darstellungen sind also die wesentlichen, weil man die reduziblen aus ihnen aufbauen kann. Wie wir noch sehen werden, ist die Zerlegung einer Darstellung in ihre irreduziblen Bestandteile (bis auf Äquivalenz) eindeutig, weil die Zahlen q_k, die angeben, wie oft eine irreduzible Darstellung Γ_k in Γ vorkommt,

$$\Gamma = \sum_k q_k \Gamma_k , \tag{26}$$

in eindeutiger Weise bestimmt sind [Gl. (38)].

Ein Beispiel für eine Ausreduktion ist in der Gruppe I der Übergang von der Darstellung ${}^2\Gamma$ in (17) zur äquivalenten Darstellung ${}^2\overline{\Gamma}$ in ($\overline{17}$). Man sieht, daß die Darstellung in die beiden irreduziblen Darstellungen ${}^1\Gamma_1$ und ${}^1\Gamma_2$ zerfällt, ${}^2\overline{\Gamma} = {}^1\Gamma_1 + {}^1\Gamma_2$.

Die Darstellung ${}^3\Gamma$ [Gl. (19)] der Gruppe D_3 liegt bereits in ausreduzierter Form vor: Sie zerfällt in eine zweidimensionale Darstellung ${}^2\Gamma_3$ (= die zweidimensionalen Matrizen links oben) und in eine eindimensionale Darstellung ${}^1\Gamma_2$ (± 1 rechts unten): ${}^3\Gamma = {}^1\Gamma_2 + {}^2\Gamma_3$. Die Darstellung ${}^2\Gamma_3$ ist, wie wir im § 5 beweisen werden, irreduzibel.

Im Darstellungsraum $\mathfrak{u}$ bedeutet die Ausreduktion, daß durch die ausreduzierende Matrix $\boldsymbol{S}$ der Raum $\mathfrak{u}$ in *invariante Teilräume* $\mathfrak{u}_1, \mathfrak{u}_2, \ldots$ (*irreduzible Darstellungsräume*) zerlegt wird, d. h., die Vektoren aus $\mathfrak{u}_1$ gehen bei den Transformationen $\boldsymbol{D}(g)$ wieder in Vektoren von $\mathfrak{u}_1$ über, usw. Durch die ausreduzierende Matrix $\boldsymbol{S}$ werden also die invarianten Teilräume aufgesucht.

b) Sätze über irreduzible Darstellungen

Ohne Beweis seien hier einige wichtige Sätze über die irreduziblen Darstellungen endlicher Gruppen angegeben: Die Anzahl nicht äquivalenter, irreduzibler Darstellungen ist gleich der Anzahl c der Klassen konjugierter Elemente (§ 2d),

$$\Gamma_1, \ldots, \Gamma_k, \ldots, \Gamma_c . \tag{27}$$

Die Dimension t_k der irreduziblen Darstellungen ist Teiler der Gruppenordnung N. Ferner gilt

$$\sum_{k=1}^{c} t_k^2 = N . \tag{28}$$

Weil bei Abelschen Gruppen $c = N$ ist, haben diese nur eindimensionale irreduzible Darstellungen.

Zwischen den Matrizen zweier irreduzibler, unitärer Darstellungen Γ_k und $\Gamma_{k'}$ einer Gruppe $\mathfrak{G}$ bestehen die *Orthogonalitätsrelationen*

$$\boxed{\sum_g D_k^{\mu\nu}(g)\, D_{k'}^{\varrho\sigma *}(g) = \frac{N}{t_k}\, \delta_{kk'}\, \delta^{\mu\varrho}\, \delta^{\nu\sigma}} \,. \tag{29}$$

Diese Beziehungen gelten für zwei inäquivalente Darstellungen ($k \neq k'$), deren Dimensionen nicht gleich sein müssen, und auch für zwei gleiche Darstellungen ($k = k'$).

Für zyklische Gruppen C_n (§ 1), die die Elemente

$$e,\ a,\ a^2,\ \ldots,\ a^n = e$$

besitzen ($N = n$), lassen sich die irreduziblen Darstellungen sofort gewinnen. Wegen der Kommutativität sind diese alle eindimensional. Für eine Darstellung $D(a)$ muß gelten $D(a)^n = 1 = e^{2\pi i k}$ (k = ganz), d. h. $D(a) = \varepsilon^k$ mit $\varepsilon = e^{2\pi i/n}$. Lassen wir k von 0 bis $n - 1$ laufen, so erhalten wir damit die n irreduziblen Darstellungen

C_n	e	a	a^2	$\cdots$	a^{n-1}
${}^1\Gamma_1$	1	1	1	$\cdots$	1
${}^1\Gamma_2$	1	ε	ε^2	$\cdots$	ε^{n-1}
${}^1\Gamma_3$	1	ε^2	ε^4	$\cdots$	ε^{2n-2}
$\vdots$	$\vdots$				$\vdots$
${}^1\Gamma_n$	1	ε^{n-1}	ε^{2n-2}	$\cdots$	$\varepsilon^{(n-1)^2}$

(30)

Man überzeugt sich sofort, daß die Orthogonalitätsrelationen (29) ($\mu = \nu = 1$, $\varrho = \sigma = 1$) erfüllt sind.

§ 5. Charaktere von Darstellungen

Unter dem Charakter χ einer Matrix D versteht man die Summe ihrer Diagonalelemente (Spur),

$$\chi(D) = \sum_{\mu=1}^{t} D^{\mu\mu} \,. \tag{31}$$

Diese Zahl ist invariant gegenüber einer Ähnlichkeitstransformation (20) (vgl. Aufg. 36). Bildet man von jeder Matrix einer (reduziblen oder irreduziblen) Darstellung ${}^t\Gamma$ die Charaktere

$$\chi(e) = t, \quad \chi(g_1), \quad \chi(g_2), \ldots, \quad \chi(g_i) \ldots, \tag{32}$$

so ist dieses Charakterensystem für alle zu Γ äquivalenten Darstellungen gleich. Man kann auch zeigen, daß zwei Darstellungen dann und nur dann äquivalent sind, wenn die Charakterensysteme übereinstimmen, d. h., *eine Darstellung wird durch ihr Charakterensystem bis auf Äquivalenz bestimmt.* Hierin liegt die funda-

mentale Bedeutung eines Charakterensystems: Es „charakterisiert" eine Darstellung. Für konjugierte Gruppenelemente (§ 2d) ist χ gleich, $\chi(\boldsymbol{D}) = \chi(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{X})$. Es genügt daher, nur die Charaktere χ_r jeder Classe $\mathfrak{C}_r$ anzugeben, d. h., ein Charakterensystem besteht aus c Zahlen.

Beispiel: Die Charakterensysteme der Darstellungen ${}^3\Gamma$ und ${}^2\Gamma_3$ [Gl. (19)] von D_3 lauten

	$\mathfrak{C}_1$ (e)	$\mathfrak{C}_2$ (a, b)	$\mathfrak{C}_3$ (c, d, f)
${}^3\Gamma$	3	0	−1
${}^2\Gamma_3$	2	−1	0

. (33)

Weil es ebensoviele irreduzible Darstellungen wie Klassen gibt, kann man die *Charakterensysteme* χ_{kr} *der irreduziblen Darstellungen* Γ_k in Form eines quadratischen Schemas anschreiben,

$\longrightarrow r$; $k \downarrow$

$\mathfrak{G}$	$\mathfrak{C}_1$ h_1	$\mathfrak{C}_2$ h_2	$\cdots$	$\mathfrak{C}_c$ h_c
${}^1\Gamma_1$	χ_{11}	χ_{12}	$\cdots$	χ_{1c}
${}^{t_2}\Gamma_2$	χ_{21}	χ_{22}	$\cdots$	χ_{2c}
$\vdots$	$\vdots$			$\vdots$
${}^{t_c}\Gamma_c$	χ_{c1}	χ_{c2}	$\cdots$	χ_{cc}

. (34)

Es gibt systematische Verfahren, nach denen man diese Charakterensysteme gewinnen kann. Für viele Gruppen sind sie auch in einschlägigen Büchern tabelliert.

Aus der Orthogonalitätsrelation (29) lassen sich leicht durch Spurbildung Relationen für die Charaktere irreduzibler Darstellungen herleiten. Es gilt für zwei irreduzible Darstellungen Γ_k und $\Gamma_{k'}$

$$\boxed{\sum_{r=1}^{c} h_r \chi_{kr} \chi_{k'r}^* = N \delta_{kk'}} \tag{35}$$

und für zwei Klassen $\mathfrak{C}_r$ und $\mathfrak{C}_{r'}$

$$\boxed{h_r \sum_{k=1}^{c} \chi_{kr} \chi_{kr'}^* = N \delta_{rr'}} \,. \tag{36}$$

Aus der Definition (31) folgt unmittelbar, daß für die Charaktere χ^{red} einer *reduziblen* Darstellung Γ^{red}, die in q_k irreduzible Darstellungen Γ_k zerfällt [Gl. (26)], gilt

$$\chi_r^{\mathrm{red}} = \sum_{k=1}^{c} q_k \chi_{kr} \,. \tag{37}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit $h_r\chi^*_{k'r}$, und summiert man über r, so erhält man nach Berücksichtigung von Gl. (35) für die ganzen Zahlen q_k ($\geqq 0$) die Beziehung

$$\boxed{q_k = \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{c} h_r\,\chi^*_{kr}\,\chi^{\text{red}}_r}\,. \tag{38}$$

Mit Hilfe dieser Relation ist man also imstande, die irreduziblen Anteile einer beliebigen reduziblen Darstellung anzugeben. Weil die Zahlen q_k durch Gl. (38) eindeutig bestimmt sind, ist damit die oben angegebene Behauptung bewiesen, daß die Zerlegung einer reduziblen Darstellung bis auf Äquivalenz eindeutig ist. Wegen dieser Eindeutigkeit ist es für die praktische Ausreduzierung häufig einfacher, die Zahlen q_k nach Gl. (37) zu erraten, als sie nach Gl. (38) zu berechnen.

Schließlich sei noch ein einfaches Kriterium dafür angegeben, ob eine vorgegebene Darstellung reduzibel ist oder nicht. Dazu bilden wir nach Gl. (38) $q_k^2 = q_k q_k^*$ (die Zahlen q_k sind ja reell) und erhalten für

$$\sum_k q_k^2 = \frac{1}{N^2}\sum_k\sum_{r,r'} h_r\,\chi^*_{kr}\,\chi_r\,h_{r'}\,\chi_{kr'}\,\chi^*_{r'}\,.$$

Die Gl. (36) erlaubt die Ausführung der Summation über k und r',

$$\sum_k q_k^2 = \frac{1}{N}\sum_r h_r\,|\chi_r|^2.$$

Die zum Charakterensystem χ_r gehörige Darstellung ist definitionsgemäß irreduzibel, wenn eine der Zahlen q_k eins und alle anderen null sind, d. h., wenn $\sum_k q_k^2 = 1$ ist. Ist hingegen diese Summe größer als eins, so ist die Darstellung sicher reduzibel. Wir erhalten also das Kriterium

$$\boxed{\sum_{r=1}^{c} h_r\,|\chi_r|^2 = \sum_g |\chi(g)|^2 = \begin{cases} N\sum_k q_k^2 > N & \text{reduzibel} \\ N & \text{irreduzibel}\end{cases}}\,. \tag{39}$$

Beispiele:

1. *Die Gruppe* $D_3 \leftrightarrow S_3$ $(N = 6)$.

Für die Darstellungen (33) liefert Gl. (39)

$${}^3\Gamma{:}\ \sum_r h_r|\chi_r|^2 = 1\cdot 9 + 2\cdot 0 + 3\cdot 1 = 12 > 6, \quad \text{also reduzibel,}$$

$${}^2\Gamma_3{:}\ \sum_r h_r|\chi_r|^2 = 1\cdot 4 + 2\cdot 1 + 3\cdot 0 = 6, \quad \text{also irreduzibel.}$$

Weil diese Gruppe gerade drei Klassen besitzt, hat sie nur drei inäquivalente, irreduzible Darstellungen. Zusammen mit den eindimensionalen Darstellungen (S. 409) lautet daher das irreduzible Charakterensystem von D_3 (oder S_3)

D_3, S_3	$h_r =$	$\mathfrak{C}_1$ 1	$\mathfrak{C}_2$ 2	$\mathfrak{C}_3$ 3
$^1\Gamma_1$		1	1	1
$^1\Gamma_2$		1	1	-1
$^2\Gamma_3$		2	-1	0

. (40)

Für die reduzible Darstellung $^3\Gamma$ [Gl. (33)] liefert die Beziehung (38)

$$q_1 = 0, \quad q_2 = 1, \quad q_3 = 1\,.$$

Die Summen der Charaktere von $^1\Gamma_2$ und $^2\Gamma_3$ ergeben gerade die Charaktere von $^3\Gamma$. Die Matrizen (19) zeigen explizit die Reduzibilität von $^3\Gamma$.

2. *Die Termaufspaltung bei Symmetrieverminderung*

In 3.6 § 7 d wurde die Aufspaltung eines Energieterms durch eine symmetrievermindernde Störung besprochen. Liegt ursprünglich z. B. für ein Atom in einem Kristallfeld ein HAMILTON-Operator der Punktsymmetrie D_3 vor, so erfolgt durch Anlegen eines homogenen Magnetfeldes in Richtung der dreizähligen Achse eine Symmetrieverminderung auf C_3. Die dadurch bedingte Termaufspaltung (ZEEMAN-Effekt) läßt sich gruppentheoretisch sofort angeben. Wir müssen dazu die irreduziblen Darstellungen von D_3 als Darstellungen der Gruppe C_3 lesen (vgl. Fig. 72, S. 249). Weil die Symmetrieelemente c, d, f in C_3 nicht vorkommen, ist die letzte Spalte in (40) wegzulassen und wir erhalten

$D_3 \to C_3$:	e	a	b
$^1\Gamma_1 \to$	1	1	1
$^1\Gamma_2 \to$	1	1	1
$^1\Gamma_3 \to$	2	-1	-1

.

Diese Darstellungen von C_3 sind auszureduzieren. Die irreduziblen Darstellungen γ_k von C_3 lauten nach Gl. (30)

C_3	e	a	b
$^1\gamma_1$	1	1	1
$^1\gamma_2$	1	ε	ε^2
$^1\gamma_3$	1	ε^2	ε

$$\varepsilon = e^{2\pi i/3}.$$

Wir erhalten

$$^1\Gamma_1 \to {}^1\gamma_1, \quad {}^1\Gamma_2 \to {}^1\gamma_1, \quad {}^2\Gamma_3 \to {}^1\gamma_2 + {}^1\gamma_3\,, \tag{41}$$

d. h., alle Energieterme, die sich in D_3 nach $^1\Gamma_1$ oder $^1\Gamma_2$ transformieren, spalten nicht auf, es entstehen Zustände, die sich im Magnetfeld nach $^1\gamma_1$ transformieren. Die zweifachen Energieterme $^2\Gamma_3$ hingegen spalten im Magnetfeld in zwei einfache Terme auf, deren Eigenvektoren sich dann nach $^1\gamma_2$ und $^1\gamma_3$ transformieren (vgl. Fig. 73, S. 249).

§ 6. Die Produktdarstellung

Von einer Gruppe $\mathfrak{G}$ betrachten wir zwei Darstellungen $\boldsymbol{D}_1(g) = (D_1^{\mu'\mu}(g))$ und $\boldsymbol{D}_2(g) = (D_2^{\nu'\nu}(g))$ der Dimensionen t_1 und t_2. Die Vektoren $|u^\mu\rangle$ und $|v^\nu\rangle$ der zugehörigen Darstellungsräume $\mathfrak{u}_{t_1}^1$ und $\mathfrak{u}_{t_2}^2$ transformieren sich also nach den Gleichungen

$$|u^\mu\rangle \xrightarrow{g} |\mathscr{D}^1(g)\,u^\mu\rangle = \sum_{\mu'=1}^{t_1} |u^{\mu'}\rangle\, D_1^{\mu'\mu}(g)$$

$$|v^\nu\rangle \xrightarrow{g} |\mathscr{D}^2(g)\,v^\nu\rangle = \sum_{\nu'=1}^{t_2} |v^{\nu'}\rangle\, D_2^{\nu'\nu}(g)\,.$$

Nun bilden wir den *Produktraum* (Kap. 2.4)

$$\mathfrak{u}_t = \mathfrak{u}_{t_1}^1 \times \mathfrak{u}_{t_2}^2\,, \tag{42}$$

für dessen Vektoren $|u^\mu\, v^\nu\rangle = |u^\mu\rangle\, |v^\nu\rangle$ dann mit $\mathscr{D}(g) = \mathscr{D}^1(g) \times \mathscr{D}^2(g)$ gilt

$$\begin{aligned} |\mathscr{D}(g)\; u^\mu\, v^\nu\rangle &= |\mathscr{D}^1(g)\,u^\mu\rangle\; |\mathscr{D}^2(g)\,v^\nu\rangle \\ &= \sum_{\mu'\nu'} |u^{\mu'}\, v^{\nu'}\rangle\, D_1^{\mu'\mu}(g)\, D_2^{\nu'\nu}(g)\,, \end{aligned}$$

oder [vgl. Gl. (2.4–19)]

$$\boxed{|\mathscr{D}(g)\,u^\mu\; v^\nu\rangle = \sum_{\mu'\nu'} |u^{\mu'}\, v^{\nu'}\rangle\, \big(D_1(g) \times D_2(g)\big)^{\mu'\nu',\mu\nu}}\,, \tag{43}$$

d. h., *die Produktvektoren werden durch die Produktmatrizen* $\boldsymbol{D}_1(g) \times \boldsymbol{D}_2(g)$ *transformiert.* Man verifiziert leicht, daß diese Produktmatrizen wieder eine Darstellung der Gruppe $\mathfrak{G}$ bilden. Diese *Produktdarstellung* von $\mathfrak{G}$ bezeichnet man mit

$$\boxed{\Gamma = \Gamma_1 \times \Gamma_2}\,. \tag{44}$$

Sie hat die Dimension $t = t_1 t_2$. Weil

$$\sum_{\mu\nu} \big(D_1(g) \times D_2(g)\big)^{\mu\nu,\mu\nu} = \sum_{\mu} D_1^{\mu\mu}(g) \sum_{\nu} D_2^{\nu\nu}(g) \tag{45}$$

gilt, sind die Charaktere der Produktdarstellung $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ gleich dem Produkt der Charaktere von Γ_1 und Γ_2

$$\boxed{\chi_{\Gamma_1 \times \Gamma_2}(g) = \chi_{\Gamma_1}(g)\, \chi_{\Gamma_2}(g)}\,. \tag{46}$$

Eine Produktdarstellung $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ kann *reduzibel* sein, auch wenn Γ_1 und Γ_2 irreduzible Darstellungen sind.

Beispiel:

D_3, S_3	$\mathfrak{C}_1$	$\mathfrak{C}_2$	$\mathfrak{C}_3$	
${}^1\Gamma_2 \times {}^1\Gamma_2$	1	1	1	$= {}^1\Gamma_1$
${}^1\Gamma_2 \times {}^2\Gamma_3$	2	-1	0	$= {}^2\Gamma_3$
${}^2\Gamma_3 \times {}^2\Gamma_3$	4	1	0	$= {}^1\Gamma_1 + {}^1\Gamma_2 + {}^2\Gamma_3$

(47)

Ihre physikalische Anwendung findet die Produktdarstellung bei *Systemzusammensetzungen* (3.6 § 7c) und bei der Aufstellung von *Auswahlregeln* (3.6 § 8).

§ 7. Die Darstellungen der Drehgruppe

Ohne auf die mathematischen Probleme der Darstellungen kontinuierlicher Gruppen einzugehen, seien noch kurz die Darstellungen der dreidimensionalen Drehgruppe $O(3)$ wegen ihrer großen physikalischen Bedeutung erwähnt.

Wir gehen dazu von den Ergebnissen 4.3 § 1d aus. Man kann zeigen, daß die durch die Gl. (4.3–37) definierten Drehmatrizen

$$R_J^{M'M}(\mathfrak{e}, \alpha) = \langle u_J^{M'} \,|\, \mathscr{R}_\mathfrak{e}(\alpha)\, u_J^M \rangle, \tag{48}$$

die zu einer Drehung α um eine Richtung $\mathfrak{e}$ gehören, Darstellungsmatrizen $\boldsymbol{R}_J$ einer $(2J + 1)$-dimensionalen, *irreduziblen* Darstellung Γ_J von $O(3)$ sind. Setzt man

$$J = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2, \ldots, \tag{49}$$

so erhält man damit (bis auf Äquivalenz) sämtliche irreduzible Darstellungen von $O(3)$.

Alle räumlichen Drehungen um einen festen Winkel α, aber beliebiger Drehachse $\mathfrak{e}$, liegen in einer Klasse $\mathfrak{C}(\alpha)$ von $O(3)$.[1] Da das Charakterensystem

$$\chi_J(\alpha) = \sum_{M=J}^{-J} R_J^{MM}(\mathfrak{e}, \alpha) \tag{50}$$

eine Klassenfunktion ist (§ 5), genügt es, zu seiner Bestimmung die Drehungen α um eine spezielle Achse zu betrachten. Als diese wählen wir die z-Achse und erhalten aus Gl. (48), weil die $|u_J^M\rangle$ Eigenvektoren von $\mathscr{J}_z$ sind,

$$R_J^{M'M}(\mathfrak{e}_z, \alpha) = \langle u_J^{M'} \,|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \mathscr{J}_z}\, u_J^M \rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha M}\, \delta^{M'M} \tag{51}$$

[1]) Es gibt also unendlich viele Klassen und deshalb auch unendlich viele, irreduzible Darstellungen (49) von $O(3)$.

und damit für das Charakterensystem der Darstellung Γ_J von $O(3)$

$$\boxed{\chi_J(\alpha) = \sum_{M=J}^{-J} e^{-i\alpha M} = \frac{\sin(2J+1)\frac{\alpha}{2}}{\sin\frac{\alpha}{2}}}. \tag{52}$$

Bei Vermehrung des Winkels α um 2π erhält man bei *halbzahligem* J nicht wieder $\chi(\alpha)$, sondern $-\chi(\alpha)$,

$$\chi_J(\alpha + 2\pi) = -\chi_J(\alpha) \qquad (J = \text{halbzahlig}). \tag{53}$$

Die halbzahligen Darstellungen sind also keine eindeutige Funktion des Drehwinkels. Diese *zweideutigen* Darstellungen von $O(3)$ haben die Eigenschaft, daß das Produkt zweier Darstellungsmatrizen $\boldsymbol{R}_J(g_1)$ und $\boldsymbol{R}_J(g_2)$ (zu irgendwelchen Drehungen g_1 und g_2) nicht immer $+\boldsymbol{R}_J(g_2 g_1)$ ist, sondern auch $-\boldsymbol{R}_J(g_2 g_1)$ sein kann,

$$\boldsymbol{R}_J(g_2)\,\boldsymbol{R}_J(g_1) = \pm\,\boldsymbol{R}_J(g_2 g_1) \qquad (J = \text{halbzahlig}). \tag{54}$$

Im Sinne von Gl. (16) handelt es sich dabei also um gar keine eigentlichen Darstellungen von $O(3)$. Andererseits sind aber nach Gl. (3.6–8) Darstellungen mit der Eigenschaft (54) im Rahmen der Quantentheorie durchaus sinnvoll und, wie das vorliegende Beispiel zeigt, auch notwendig: $\boldsymbol{R}_J$ $(J = \frac{1}{2})$ beschreibt das Transformationsverhalten der Spineigenvektoren bei Drehungen im Raum (vgl. Aufg. 103).

Die *Produktdarstellung*

$$\Gamma_{J_1} \times \Gamma_{J_2}$$

der Gruppe $O(3)$ hat nach Gl. (46) das Charakterensystem

$$\chi_{J_1 \times J_2}(\alpha) = \sum_{M_1=J_1}^{-J_1} e^{-iM_1\alpha} \sum_{M_2=J_2}^{-J_2} e^{-iM_2\alpha}.$$

Diese Doppelsumme kann man umordnen in

$$\begin{aligned}\chi_{J_1 \times J_2}(\alpha) &= \sum_{M=J_1+J_2}^{-(J_1+J_2)} e^{-iM\alpha} + \sum_{M=J_1+J_2-1}^{-(J_1+J_2-1)} e^{-iM\alpha} + \cdots \sum_{M=|J_1-J_2|}^{-|J_1-J_2|} e^{-iM\alpha} \\ &= \chi_{J_1+J_2}(\alpha) + \chi_{J_1+J_2-1}(\alpha) + \cdots \chi_{|J_1-J_2|}(\alpha),\end{aligned}$$

d. h., *die Produktdarstellung von* $O(3)$ *enthält die irreduziblen Darstellungen*

$$\boxed{\Gamma_{J_1} \times \Gamma_{J_2} = \Gamma_{J_1+J_2} + \Gamma_{J_1+J_2-1} + \cdots \Gamma_{|J_1-J_2|}}. \tag{55}$$

Diese Clebsch-Gordan-Beziehung hat eine große quantentheoretische Bedeutung: Sie stellt einerseits das *Additionsgesetz von Drehimpulsen* dar (vgl. 3.6 § 7c und 4.3 § 7) und führt andererseits auf *Auswahlregeln bei kugelsymmetrischen Problemen* (3.6 § 8).

Lösungen der Aufgaben[1])

1, S. 34: Bildet man von $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ — eine Funktion der $q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t$ — die totale zeitliche Ableitung, so erhält man für $q_i(t)$ das Differentialgleichungssystem 2. Ordnung

$$\sum_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \, \partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j + \sum_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \, \partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \, \partial t} = \frac{\partial L}{\partial q_i}.$$

2, S. 34: $\frac{\mathrm{d}(\mathfrak{r}\mathfrak{p})}{\mathrm{d}t} = \dot{\mathfrak{r}}\,\mathfrak{p} + \mathfrak{r}\dot{\mathfrak{p}} = m\dot{\mathfrak{r}}^2 - \mathfrak{r}\,\mathrm{grad}\,V$. Die Größe $\mathfrak{r}\,\mathfrak{K} = -\mathfrak{r}\,\mathrm{grad}\,V$ bezeichnet man als Virial. Ist $V(\mathfrak{r})$ homogen vom Grad α, d. h. $V(\lambda\mathfrak{r}) = \lambda^\alpha V(\mathfrak{r})$, dann gilt $\mathfrak{r}\,\mathrm{grad}\,V = \alpha V$ (EULER). Damit ergibt sich

$$\frac{\mathrm{d}(\mathfrak{r}\mathfrak{p})}{\mathrm{d}t} = 2T - \alpha V \qquad (T = \text{kinetische Energie}).$$

Beispiele: Oszillatorpotential $V = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \quad \alpha = 2,$

COULOMB-Potential $V = \frac{q_1 q_2}{r}, \qquad \alpha = -1.$

3, S. 34: Aus $\Omega(q_1, \ldots, t)$ folgt

$$\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}t} = \sum_i \frac{\partial \Omega}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \Omega}{\partial t}.$$

Verwendet man eine solche Form als LAGRANGE-Funktion $L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)$, so ergibt sich

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \Omega}{\partial q_i}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_k \frac{\partial^2 \Omega}{\partial q_i \partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial q_i \, \partial t} = \frac{\partial L}{\partial q_i}.$$

Die LAGRANGEschen Gleichungen sind also identisch erfüllt.[2])

Dieses Ergebnis kann man auch direkt aus dem Wirkungsprinzip ersehen, wenn man bedenkt, daß die Variation $\delta \int_{P^0}^{P^1} \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t = \delta\Omega(P^1) - \delta\Omega(P^0)$ an den festen Endpunkten verschwindet.

Eine Anwendung dieses Sachverhaltes findet sich in 1.2 § 3.

---

[1]) Die mit einem Stern bezeichneten Aufgaben sind etwas schwieriger als die anderen, so daß bei ihnen die Zuhilfenahme der Lösungen angemessen ist.

[2]) Hängt die Funktion Ω auch von den Geschwindigkeiten $\dot{q}_i$ ab, so treten in $L = \mathrm{d}\Omega/\mathrm{d}t$ die Beschleunigungen $\ddot{q}_i$ auf, was in 1.2 § 1 nicht vorgesehen ist. Erweitert man die Variationsrechnung auf $L(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, \ddot{q}_1, \ldots, t)$, so erhält man modifizierte EULER-LAGRANGE-Gleichungen. Im Spezialfall $L = \mathrm{d}\Omega(q_1, \ldots, \dot{q}_1, \ldots, t)/\mathrm{d}t$ sind diese wieder identisch erfüllt (vgl. dazu auch Aufg. 23).

4, S. 37: Aus der Lösung für ein freies Teilchen

$$\mathfrak{r}(t) = \mathfrak{r}^0 + \frac{\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0}{t^1 - t^0}(t - t^0), \quad \dot{\mathfrak{r}} = \frac{\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0}{t^1 - t^0} = \frac{\mathfrak{r} - \mathfrak{r}^0}{t - t^0}$$

folgt

$$L(t, P^1, P^0) = \frac{m}{2}\dot{\mathfrak{r}}^2 = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0}{t^1 - t^0}\right)^2 \text{ [1]}$$

und hieraus nach Gl. (1.2–19) die Wirkungsfunktion

$$S(P^1, P^0) = \frac{m}{2}\frac{(\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0)^2}{t^1 - t^0}.$$

Wegen $E = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0}{t^1 - t^0}\right)^2$ lautet Gl. (1.2–24)

$$\mathfrak{p}(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}^1, \mathfrak{r}^0, E) = \sqrt{2mE}\,\frac{\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0}{|\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0|},$$

und Gl. (1.2–25) führt auf die charakteristische Funktion

$$W(\mathfrak{r}^1, \mathfrak{r}^0, E) = \sqrt{2mE}\,|\mathfrak{r}^1 - \mathfrak{r}^0|.$$

Die Flächen $W(\mathfrak{r}) = \sqrt{2mE}\,|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}^0| = \text{const}$ sind Kugeln um $\mathfrak{r}^0$. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit von S auf der Kugelnormalen beträgt $v_S = v_T/2$.

5, S. 41: Eine Dehnung wird durch $x_i \to x_i' = a x_i$ beschrieben. Für eine infinitesimale Dehnung ist $a = 1 + \delta a$, d. h.

$$\delta x_i = x_i\,\delta a \quad (\delta a = \text{const}), \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta x_i = \dot{x}_i\,\delta a, \quad \delta t = 0.$$

Die Bedingungsgleichung (1.2–40) für die Invarianz der LAGRANGE-Funktion ($\delta\Omega = 0$) gegen Dehnung ergibt

$$\sum\left(\frac{\partial L}{\partial x_i}x_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\dot{x}_i\right) = 0. \tag{a}$$

Nach Gl. (1.2–41) hätte eine solche Invarianz die Erhaltung von

$$\sum \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}x_i = \mathfrak{p}\mathfrak{r} = \text{const} \tag{b}$$

zur Folge. Die LAGRANGE-Funktion (1.2–16) eines Teilchens erfüllt jedoch Gl. (a) nicht.

6, S. 45: Aus $L = \frac{m}{2}\dot{\mathfrak{r}}^2 - V(\mathfrak{r})$ folgt $\mathfrak{p} = m\dot{\mathfrak{r}}$, so daß man als HAMILTON-Funktion

$$H(\mathfrak{r}, \mathfrak{p}) = \frac{\mathfrak{p}^2}{2m} + V(\mathfrak{r})$$

erhält. Die HAMILTONschen Gleichungen führen auf

$$\dot{\mathfrak{r}} = \frac{1}{m}\mathfrak{p}, \quad \dot{\mathfrak{p}} = -\operatorname{grad} V, \quad \dot{H} = 0.$$

Die HAMILTON-JACOBIsche Gleichung lautet

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\operatorname{grad} S)^2 + V(\mathfrak{r}) = 0.$$

---

[1]) In diesem Spezialfall besteht keine t-Abhängigkeit.

7, S. 45: Unter Verwendung von Gl. (1.2–62, 63 u. 66) folgt

$$\{l_i, x_i\} = 0, \quad \{l_1, x_2\} = -x_3, \ldots, \quad \{l_i, \mathfrak{r}^2\} = 0,$$
$$\{l_i, p_i\} = 0, \quad \{l_1, p_2\} = -p_3, \ldots, \quad \{l_i, \mathfrak{p}^2\} = 0,$$
$$\{l_i, l_i\} = 0, \quad \{l_1, l_2\} = -l_3, \ldots, \quad \{l_i, \mathfrak{l}^2\} = 0.$$

8, S. 45: $\dot{l}_1 = \{H, l_1\} = \left\{\frac{\mathfrak{p}^2}{2m}, l_1\right\} + \{V, l_1\}$. Nach Aufg. 7 verschwindet die erste Poisson-Klammer. Für die zweite findet man mittels Gl. (1.2–65)

$$\dot{l}_1 = x_2\{V, p_3\} - x_3\{V, p_2\} = -x_2\frac{\partial V}{\partial x_3} + x_3\frac{\partial V}{\partial x_2} = -(\mathfrak{r}\times \operatorname{grad} V)_1$$
$$= (\mathfrak{r}\times\mathfrak{K})_1 = M_1 \qquad \text{(Drehimpulssatz).}$$

9, S. 45: Wegen

$$0 = \{H, F_1\} + \left(\frac{\partial F_1}{\partial t}\right)_{\text{ex}}$$
$$0 = \{H, F_2\} + \left(\frac{\partial F_2}{\partial t}\right)_{\text{ex}}$$

erhält man aus der Poissonschen Identität (1.2–64), wenn man $F_3 = H$ setzt,

$$\left\{F_1, \left(\frac{\partial F_2}{\partial t}\right)_{\text{ex}}\right\} + \left\{\left(\frac{\partial F_1}{\partial t}\right)_{\text{ex}}, F_2\right\} + \{H, \{F_1, F_2\}\} = 0$$

oder

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\{F_1, F_2\}\right)_{\text{ex}} + \{H, \{F_1, F_2\}\} = \frac{\mathrm{d}\{F_1, F_2\}}{\mathrm{d}t} = 0.$$

10, S. 49:

$$\{v_1, v_2\} = \frac{1}{m^2}\left\{p_1 - \frac{q}{c}A_1, p_2 - \frac{q}{c}A_2\right\}$$
$$= \frac{q}{m^2 c}(-\{A_1, p_2\} - \{p_1, A_2\})$$
$$= \frac{q}{m^2 c}\left(\frac{\partial A_1}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_1}\right)$$
$$= -\frac{q}{m^2 c}B_3, \ldots .$$

11, S. 49: Wegen $\operatorname{grad} W = \mathfrak{p} = m\dot{\mathfrak{r}} + \frac{q}{c}\mathfrak{A}(\mathfrak{r})$ hat $\dot{\mathfrak{r}}$ i. allg. nicht die Richtung von $\operatorname{grad} W$.

***12**, S. 56: In

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\limits_{V(t)} \varrho(\mathfrak{r}, t)\,\mathrm{d}^3x = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left(\int\limits_{V(t+\Delta t)} \varrho(\mathfrak{r}, t+\Delta t)\,\mathrm{d}^3x - \int\limits_{V(t)} \varrho(\mathfrak{r}, t)\,\mathrm{d}^3x\right)$$

fügen wir zum zweiten Integral $\int\limits_{V(t+\Delta t)} \varrho(\mathfrak{r}, t)\,\mathrm{d}^3x$ hinzu, subtrahieren es vom ersten und erhalten

$$\int\limits_{V(t)} \frac{\partial\varrho}{\partial t}\,\mathrm{d}^3x + \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int\limits_{\Delta V} \varrho(\mathfrak{r}, t)\,\mathrm{d}^3x.$$

Im zweiten Teil ist dabei über das Volumen $\Delta V = V(t + \Delta t) - V(t)$ zu integrieren, das im Zeitelement Δt durch die Bewegung der Materie hinzukommt. Wird dabei ein Flächenelement $d\mathfrak{f}$ um $\delta\mathfrak{s}$ verschoben, so ist das entstehende Volumelement $\delta V = d\mathfrak{f}\,\delta\mathfrak{s}$. Daher ist $\varrho\frac{\delta V}{\Delta t} = \varrho\frac{\delta\mathfrak{s}}{\Delta t}d\mathfrak{f} = \varrho\,\mathfrak{v}\,d\mathfrak{f}$ und aus dem zweiten Integral wird

$$\int\limits_{F(t)} \varrho\,\mathfrak{v}\,d\mathfrak{f},$$

so daß man mit Hilfe des GAUSSschen Satzes erhält

$$\int\limits_{V(t)} \left(\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \operatorname{div}\varrho\,\mathfrak{v}\right) d^3x = 0.$$

Durch Anwendung auf ein infinitesimales Volumelement folgt die Kontinuitätsgleichung (1.3–19).

13, S. 58:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \sqrt{\frac{\hbar\omega - V_2}{\hbar\omega - V_1}}.$$

[Vgl. dazu die Grenzbedingung (1.4–13).]

14, S. 63: Multipliziert man Gl. (1.3–38) mit $\frac{i}{\hbar}\psi^*$ und die dazu konjugiert-komplexe Gleichung mit $-\frac{i}{\hbar}\psi$, so erhält man eine Beziehung, die sich in der Form

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathfrak{i} = 0$$

schreiben läßt, wobei sich für ϱ und $\mathfrak{i}$ die in Gl. (1.4–11) gegebenen Ausdrücke ergeben. Führt man in diesen die durch die Gln. (1.3–40 u. 1.3–41) gegebene Phasen-Eich-Transformation der Feldgrößen $\mathfrak{A}$, φ und ψ ein, so ersieht man sofort die Invarianz von Ladung und Strom,

$$\varrho' = \varrho, \quad \mathfrak{i}' = \mathfrak{i}.$$

****15***, S. 68: Die zeitliche Veränderung des *Feldimpulses* ist nach Gl. (1.4–28) gegeben durch

$$\dot{\mathfrak{P}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\operatorname{grad}\psi + \psi^*\operatorname{grad}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)d^3x.$$

Der Integrand läßt sich vermöge der SCHRÖDINGERschen Feldgleichung umformen. Dazu multiplizieren wir Gl. (1.4–2) mit $\operatorname{grad}\psi^*$, Gl. (1.4–2*) mit $\operatorname{grad}\psi$ und erhalten nach Addition

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\operatorname{grad}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\operatorname{grad}\psi\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi\cdot\operatorname{grad}\psi^* + \Delta\psi^*\cdot\operatorname{grad}\psi) + V\psi\operatorname{grad}\psi^* + V\psi^*\operatorname{grad}\psi. \end{aligned} \tag{a}$$

Das Integral über die linke Seite dieser Gleichung führt auf $\dot{\mathfrak{P}}$, wenn man berücksichtigt, daß

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}\operatorname{grad}\psi^* + \psi^*\operatorname{grad}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \operatorname{grad}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*\right)$$

gilt und das Integral über den Gradienten in ein Oberflächenintegral verwandelt werden kann, das im Unendlichen verschwindet. Der erste Teil der rechten Seite von Gl. (a) liefert keinen Beitrag, weil er als Divergenz geschrieben werden kann,

$$\Delta\psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x_i} + \Delta\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x_i} = \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x_k}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_i} + \frac{\partial\psi}{\partial x_i}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_k} - \delta_{ik}\sum_l \frac{\partial\psi}{\partial x_l}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_l}\right).$$

Berücksichtigen wir schließlich

$$\operatorname{grad}(V\psi\psi^*) = \operatorname{grad} V \cdot \psi\psi^* + V \operatorname{grad}\psi \cdot \psi^* + V\psi \operatorname{grad}\psi^*,$$

so erhalten wir wegen $\int \operatorname{grad}(V\psi\psi^*)\, d^3x = \oint V\psi\psi^*\, d\mathfrak{f} = 0$, daß die Veränderung des gesamten Feldimpulses

$$\dot{\mathfrak{P}} = -\int \psi^* \operatorname{grad} V \cdot \psi\, d^3x$$

durch das Integral über die auf das Feld wirkende Kraftdichte gegeben ist.

Durch eine entsprechende Rechnung findet man für die zeitliche Veränderung des gesamten *Felddrehimpulses* (1.4–31)

$$\dot{\mathfrak{L}} = \frac{\hbar}{i}\int \mathfrak{r}\times\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\operatorname{grad}\psi + \psi^*\operatorname{grad}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) d^3x$$

den Drehimpulssatz (1.4–32).

Wegen

$$\mathfrak{L} - \mathfrak{L}^* = \frac{\hbar}{i}\int \mathfrak{r}\times(\psi^*\operatorname{grad}\psi + \psi\operatorname{grad}\psi^*)\, d^3x = \frac{\hbar}{i}\int \mathfrak{r}\times\operatorname{grad}(\psi^*\psi)\, d^3x$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\int \operatorname{rot}(\psi^*\psi\mathfrak{r})\, d^3x = \frac{\hbar}{i}\oint \psi^*\psi\mathfrak{r}\times d\mathfrak{f} = 0$$

ist der Felddrehimpuls $\mathfrak{L}$ ein *reeller* Vektor.

16, S. 73: Das Feld $\psi(\mathfrak{r}, t) = (A_+ e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}} + A_- e^{-i\mathfrak{k}\mathfrak{r}})\, e^{-i\omega t}$, das z. B. bei einer Reflexion an einer Potentialschwelle entsteht (vgl. Aufg. 20), hat nach Gl. (1.4–5 u. 19) die zeitlich konstanten Dichten

$$\varrho = C\ \ [|A_+|^2 + |A_-|^2 + 2\,|A_+A_-|\cos(2\,\mathfrak{k}\mathfrak{r} + \alpha_+ - \alpha_-)]$$

$$w = \hbar\omega[|A_+|^2 + |A_-|^2 - 2\,|A_+A_-|\cos(2\,\mathfrak{k}\mathfrak{r} + \alpha_+ - \alpha_-)] \qquad (A_\pm = |A_\pm|\, e^{i\alpha_\pm}).$$

Sie sind keineswegs die Summe der Dichten der einzelnen Wellen, es treten vielmehr *ortsabhängige Interferenzterme* auf. Die Ströme hingegen setzen sich (vektoriell) additiv aus den Einzelströmen zusammen

$$\mathfrak{i} = C\frac{\hbar}{m}\mathfrak{k}\,(|A_+|^2 - |A_-|^2) = \mathfrak{i}_+ + \mathfrak{i}_-, \text{ und analog } \mathfrak{s} = \mathfrak{s}_+ + \mathfrak{s}_-.$$

Ein Interferenzterm ist hier nicht möglich, weil die Kontinuitätsgleichungen $\operatorname{div}\mathfrak{i} = \operatorname{div}\mathfrak{s} = 0$ einen ortsunabhängigen Strom erfordern.

17, S. 73: Schreibt man den Laplace-Operator Δ in Kugelkoordinaten (r, ϑ, φ), so nimmt die Schwingungsgleichung $\Delta u + k^2 u = 0$ die Gestalt

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} + ku^2 = 0$$

an. Der Produktansatz $u = R(r)\,\theta(\vartheta)\,\Phi(\varphi)$ führt auf die gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2(rR)}{\mathrm{d}r^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0$$

mit $R = j_l(kr) = \dfrac{J_{l+\frac{1}{2}}(kr)}{\sqrt{r}}$ = sphärische BESSEL-Funktionen,

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right]\theta = 0$$

mit $\theta = P_l^m(\vartheta)$ = zugeordnete LEGENDREsche Funktionen (vgl. S. 302), und

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} + m^2\Phi = 0$$

mit $\Phi = \mathrm{e}^{\pm im\varphi}$.

Eindeutigkeit und Regularität von Φ und θ erfordern, daß m und l ganze Zahlen mit $|m| \leqq l$ sind. Den winkelabhängigen Anteil $\theta\,\Phi$ nennt man Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \Phi)$ [vgl. 4.3–§ 2].

18, S. 81: Die Eigenwertgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u_E}{\mathrm{d}x^2} - \hat{V}\,\delta(x)\,u_E = E\,u_E$$

hat für $x \neq 0$ die Lösungen

$$u_E(x) = C_1\mathrm{e}^{\varkappa x} + C_2\mathrm{e}^{-\varkappa x},$$

wenn man

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (E < 0 \text{ für gebundene Zustände})$$

setzt. Damit für $x \to \pm\infty$ die Lösung nicht divergiert, muß man für $x > 0$ $C_1 = 0$ und für $x < 0$ $C_2 = 0$ wählen. Also

$$u_E(x) = \begin{cases} C_2\mathrm{e}^{-\varkappa x} & \text{für} \quad x > 0, \\ C_1\mathrm{e}^{+\varkappa x} & \text{für} \quad x < 0. \end{cases}$$

Aus den Grenzbedingungen (1.4–15)

$$u_E(-0) = u_E(+0) \quad \text{und} \quad \left(\frac{\mathrm{d}u_E}{\mathrm{d}x}\right)_{+0} - \left(\frac{\mathrm{d}u_E}{\mathrm{d}x}\right)_{-0} = -\frac{2m}{\hbar^2}\hat{V}\,u_E(0)$$

folgt $C_1 = C_2 = C$ und $\varkappa = \dfrac{m}{\hbar^2}\hat{V}$, d. h., es liegt *ein* gebundener Zustand mit der Energie

$$E = -\frac{m\hat{V}^2}{2\hbar^2}$$

vor. Aus der Normierungsbedingung

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |u_E(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{|C|^2}{\varkappa} = 1$$

folgt $C = \sqrt{\varkappa}$. Damit lautet die normierte Eigenfunktion des gebundenen Zustands

$$u_E(x) = \sqrt{\varkappa}\,\mathrm{e}^{-\varkappa|x|}.$$

19, S. 81: In den kräftefreien Gebieten $x \neq 0$, a lauten die normierbaren Energieeigenfunktionen

$$u_E(x) = \begin{cases} A_1 e^{\varkappa x} & \text{für } x < 0 \\ A_2 e^{\varkappa x} + B_2 e^{-\varkappa x} & \text{für } 0 < x < a \\ \qquad\qquad B_3 e^{-\varkappa x} & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

mit

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad (E < 0 \text{ für gebundene Zustände}).$$

Die Grenzbedingungen (1.4–15) an den Stellen $x = 0$ und a ergeben die Gleichungen

$$\begin{aligned} A_1 \quad - A_2 \quad - B_2 \quad &= 0, \\ (-\varkappa + \varphi) A_1 \quad + \varkappa A_2 \quad - \varkappa B_2 \quad &= 0 \\ + e^{\varkappa a} A_2 \quad + e^{-\varkappa a} B_2 \quad - e^{-\varkappa a} B_3 &= 0 \\ - \varkappa e^{\varkappa a} A_2 + \varkappa e^{-\varkappa a} B_2 + (-\varkappa + \varphi) e^{-\varkappa a} B_3 &= 0 \end{aligned} \qquad \left(\varphi = \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}\right)$$

die nur dann eine von Null verschiedene Lösung besitzen, falls die Determinante ihrer Koeffizienten verschwindet

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ -\varkappa + \varphi & \varkappa & -\varkappa & 0 \\ 0 & e^{\varkappa a} & e^{-\varkappa a} & -e^{-\varkappa a} \\ 0 & -\varkappa e^{\varkappa a} & \varkappa e^{-\varkappa a} & (-\varkappa + \varphi) e^{-\varkappa a} \end{vmatrix} = 0.$$

Die Ausrechnung führt auf die Gleichung

$$\varphi = \frac{2\varkappa}{1 \pm e^{-\varkappa a}},$$

die die möglichen Energieeigenwerte E bestimmt. Für $a \to \infty$ existiert nur *ein* Topf, wir erhalten mit $\varphi = 2\varkappa$ wieder das Ergebnis von Aufg. 18. Für endlichen Abstand a hingegen existieren zwei Energieterme E_+ und E_-, falls $\hat{V} > \frac{\hbar^2}{am}$ ist. Die zu E_+ und E_- gehörigen Eigenfunktionen $u_{E_+}(x)$ und $u_{E_-}(x)$ sind bezüglich des Mittelpunkts $x = a/2$ gerade bzw. ungerade. Für $a \to 0$ wird $\varphi = \varkappa$, die Energie $E = -\frac{2m\hat{V}^2}{\hbar^2}$ ist die *eines* Topfes mit der Stärke $2\hat{V}$.

20, S. 81: Die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u_E + \hat{V}\, \delta(x) = E u_E\,(x) \qquad (\hat{V} \gtrless 0)$$

hat für nichtgebundene Zustände ($E > 0$) die Lösung

$$u_E(x) = \begin{cases} A_e e^{ikx} + A_r e^{-ikx} & \text{für} \quad x < 0 \\ A_d e^{ikx} & \text{für} \quad x > 0 \end{cases}$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Dabei ist die Ausstrahlungsbedingung (1.5–47) berücksichtigt, d. h., für $x > 0$ soll keine Welle einfallen. Die Grenzbedingungen (1.4–15) liefern

$$A_e + A_r = A_d,$$

$$\mathrm{i}k(A_d - A_e + A_r) = \frac{2m}{\hbar^2}\,\hat{V}\,A_d\,.$$

Hieraus folgt für die Amplitude der reflektierten Welle

$$A_r = A_e \frac{1}{\mathrm{i}\,\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}} - 1}$$

und für die der durchgehenden Welle

$$A_d = A_e + A_r = A_e \frac{\mathrm{i}\,\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}}}{\mathrm{i}\,\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}} - 1}\,.$$

Für das Reflexionsvermögen ergibt sich damit

$$R = \left|\frac{A_r}{A_e}\right|^2 = \frac{1}{\left(\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}}\right)^2 + 1}$$

und für die Durchlässigkeit

$$D = \left|\frac{A_d}{A_e}\right|^2 = \frac{\left(\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}}\right)^2}{\left(\dfrac{\hbar^2 k}{m\hat{V}}\right)^2 + 1}\,.$$

Hieraus ersieht man, daß

$$R + D = 1$$

gilt. Diese Beziehung ist eine unmittelbare Folge der Materieerhaltung. Für den Strom des Materiefeldes $u_E(x)$ ergibt sich nämlich (vgl. Aufg. 16)

$$i(x) = \begin{cases} C\,\dfrac{\hbar}{m}\,(|A_e|^2 - |A_r|^2) & \text{für} \quad x < 0 \\ C\,\dfrac{\hbar}{m}\,|A_d|^2 & \text{für} \quad x > 0\,. \end{cases}$$

Weil aber an der Potentialschwelle keine Materie verschwindet, muß $|A_e|^2 - |A_r|^2 = |A_d|^2$ sein.

21, S. 86: Das Materiefeld $\psi(\mathfrak{r}, t)$ läßt sich als Linearkombination der Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ von Gl. (1.5–69) darstellen [vgl. Gl. (1.5–10b)]

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \mathop{\mathrm{S}}_{a} c_a u_a(\mathfrak{r})\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_a t}\, da\,. \tag{a}$$

Die Amplituden c_a bestimmen sich aus der gegebenen Anfangsverteilung

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = \mathop{\mathrm{S}}_{a} c_a u_a(\mathfrak{r})\, da,$$

indem man mit $u_{a'}^*(\mathfrak{r})$ multipliziert und über den Ortsraum integriert. Berücksichtigt man auf der rechten Seite die Orthonormierung (1.5–70), so erhält man

$$c_a = \int \psi(\mathfrak{r}, 0)\, u_a^*(\mathfrak{r})\, d^3x. \qquad \text{(b)}$$

Setzt man dieses Ergebnis in (a) ein, so folgt

$$\left.\boxed{\begin{aligned} \psi(\mathfrak{r}, t) &= \int U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t)\, \psi(\mathfrak{r}', 0)\, d^3x', \\ U(\mathfrak{r},\mathfrak{r}'; t) &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_a u_a(\mathfrak{r})\, u_a^*(\mathfrak{r}')\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t}\, da \end{aligned}}\;.\right\} \qquad \text{(c)}$$

mit

Sind also die Eigenfunktionen $u_a(\mathfrak{r})$ alle bekannt, so läßt sich aus ihnen die Funktion $U(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}'; t)$ bestimmen. Diese erlaubt dann die Berechnung des Feldes $\psi(\mathfrak{r},t)$, wenn $\psi(\mathfrak{r}, 0)$ bekannt ist. Ein Beispiel hierfür ist die in 1.5 § 3 behandelte kräftefreie Bewegung eines Materiefeldes.

Ist die Anfangsverteilung $\psi(\mathfrak{r}', 0)$ insbesondere eine Eigenfunktion $u_{a_0}(\mathfrak{r}')$, so liefert in Gl. (c) das Integral über $\mathfrak{r}'$ gerade $\delta(a, a_0)$, und man erhält die stationäre Lösung

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = u_{a_0}(\mathfrak{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t},$$

d. h. Gl. (1.5–9).

22, S. 89: Entwickelt man das Feld entsprechend Gl. (1.5–75) nach *irgendeinem vollständigen Orthogonalsystem* $v_k(\mathfrak{r})$, so erhält man aus Gl. (1.4–22) für den Schwerpunkt des SCHRÖDINGER-Feldes

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{R}(t) &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k,k'} \mathfrak{r}_{kk'} c_k^*(t)\, c_{k'}(t)\, dk\, dk' \\ \mathfrak{r}_{kk'} &= \frac{1}{N} \int v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathfrak{r} v_{k'}(\mathfrak{r})\, d^3x, \end{aligned}\right\} \qquad \text{(a)}$$

mit

und aus Gl. (1.4–31) für den Gesamtdrehimpuls des SCHRÖDINGER-Feldes

$$\left.\begin{aligned} \mathfrak{L}(t) &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{k,k'} \mathfrak{l}_{kk'}\, c_k^*(t)\, c_{k'}(t)\, dk\, dk' \\ \mathfrak{l}_{kk'} &= \frac{\hbar}{i} \int v_k^*(\mathfrak{r})\, \mathfrak{r} \times \operatorname{grad} v_{k'}(\mathfrak{r})\, d^3x. \end{aligned}\right\} \qquad \text{(b)}$$

mit

Für eine Entwicklung nach *ebenen Wellen* $v_k \to v_{\mathfrak{k}} = (2\pi)^{-3/2}\, e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}$ wird daher

$$\mathfrak{r}_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'} = \frac{1}{(2\pi)^3 N} \int e^{i(\mathfrak{k}'-\mathfrak{k})\mathfrak{r}}\, \mathfrak{r}\, d^3x.$$

Bildet man von der FOURIER-Darstellung der δ-Funktion [Gl. (5.1–25)],

$$\delta(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathfrak{k}'-\mathfrak{k})\mathfrak{r}}\, d^3x,$$

den Gradienten nach $\mathfrak{k}'$,

$$\operatorname{grad}_{\mathfrak{k}'} \delta(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k}) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathfrak{k}'-\mathfrak{k})\mathfrak{r}}\, \mathfrak{r}\, d^3x,$$

so ergibt sich

$$\mathfrak{r}_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'} = \frac{1}{\mathrm{i}N} \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}'} \delta(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k}). \tag{c}$$

Damit lautet die Entwicklung des Feldschwerpunktes nach ebenen Wellen

$$\mathfrak{R}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}N} \int\int \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}'} \delta(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k})\, c^*(\mathfrak{k}, t)\, c(\mathfrak{k}', t)\, \mathrm{d}^3k\, \mathrm{d}^3k'$$

$$\boxed{\mathfrak{R}(t) = -\frac{1}{\mathrm{i}N} \int c^*(\mathfrak{k}, t) \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}} c(\mathfrak{k}, t)\, \mathrm{d}^3k}, \tag{d}$$

wenn man Gl. (5.1–29) berücksichtigt.

Entsprechend findet man für

$$\mathfrak{l}_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'} = \frac{\hbar}{(2\pi)^3\mathrm{i}} \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathfrak{k}\mathfrak{r}}\, \mathfrak{r} \times \operatorname{grad}_{\mathfrak{r}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathfrak{k}'\mathfrak{r}}\, \mathrm{d}^3x = \frac{\hbar}{(2\pi)^3} \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathfrak{k}'-\mathfrak{k})\mathfrak{r}} (\mathfrak{r} \times \mathfrak{k}')\, \mathrm{d}^3x$$

oder

$$\mathfrak{l}_{\mathfrak{k}\mathfrak{k}'} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}'} \delta(\mathfrak{k}' - \mathfrak{k}) \times \mathfrak{k}'. \tag{e}$$

Für den Felddrehimpuls ergibt sich daher die Entwicklung nach ebenen Wellen

$$\boxed{\mathfrak{L}(t) = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int c^*(\mathfrak{k}, t) \operatorname{grad}_{\mathfrak{k}} c(\mathfrak{k}, t) \times \mathfrak{k}\, \mathrm{d}^3k}. \tag{f}$$

***23**, S. 102: Betrachtet man denselben Raum-Zeit-Punkt in zwei Inertialsystemen Σ und Σ', die durch eine GALILEI-Transformation der Geschwindigkeit v auseinander hervorgehen, so wird er

in Σ durch die Koordinaten x, t und

in Σ' durch die Koordinaten $x' = x + vt$, t

beschrieben. Die Materiefeldfunktion laute

in Σ $\psi(x, t)$ und in Σ' $\psi'(x', t)$

und genüge in beiden Systemen der kräftefreien SCHRÖDINGERschen Materiefeldgleichung

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad \text{(a)} \quad \text{und} \quad \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi'}{\partial x'^2}. \tag{a'}$$

Damit diese Forminvarianz der Feldgleichung gewährleistet ist, muß ein Zusammenhang zwischen ψ und ψ' bestehen, den wir in der Gestalt

$$\psi'(x', t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}f(x',t)}\, \psi(x' - vt, t) \tag{b}$$

ansetzen. Für die unbekannte Funktion $f(x', t)$ ergibt sich durch Einsetzen von (b) in (a′) und Berücksichtigung von (a)

$$\psi \left\{ -\mathrm{i} \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x'^2} + \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial t} \right\} + \mathrm{i} \frac{\partial\psi}{\partial x} \left\{ -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial f}{\partial x'} + v \right\} = 0.$$

Damit f für alle Werte von ψ dieselbe Funktion ist, müssen die geschweiften Klammern verschwinden. Die zweite ergibt

$$f(x', t) = \frac{mv}{\hbar} x' + \varphi(t).$$

Eingesetzt in die erste findet man $\varphi(t) = -\frac{mv^2}{2\hbar} t$. Also

$$f(x', t) = \frac{mv}{\hbar} x' - \frac{mv^2}{2\hbar} t. \tag{c}$$

Weil sich f reell ergibt, ist die Transformation (b) eine Phasentransformation. Die Materiedichte ϱ ist also invariant gegen eine GALILEI-Transformation.

Die durch Gl. (1.7–31) definierte infinitesimale Feldänderung $\delta\psi$ bei einer infinitesimalen GALILEI-Transformation $\delta x = t\,\delta v$ ($\delta v = \text{const}$), erhalten wir durch Entwicklung von (b) und (c) nach δv

$$\psi'(x', t) = \psi(x', t) + \left(\frac{i}{\hbar} m x' - t\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x', t)\,\delta v$$

oder

$$\delta\psi(x', t) = \left(\frac{i}{\hbar} m x' - t\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi\,\delta v. \tag{d}$$

Setzt man δx und $\delta\psi$ in die Symmetriebedingung (1.7–33) ein, so ergibt sich aus der LAGRANGE-Funktion (1.7–24) mit $V = 0$ für die ersten vier Terme

$$\left\{\frac{\hbar}{i} t\,\dot{\psi}\,\frac{\partial\psi^*}{\partial x} + \frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial x}(\psi\psi^*) + \frac{\hbar^2}{2m} t\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) + \frac{\hbar}{i}\left(t\frac{\partial\dot{\psi}}{\partial x}\psi^* + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right\}\delta v.$$

Unter Verwendung der Feldgleichung läßt sich dieser Ausdruck in der Tat als Summe einer örtlichen und einer zeitlichen Ableitung schreiben, wie es die Symmetriebedingung (1.7–33) erfordert. Man findet

$$\delta\Omega_x = -\left(\frac{\hbar^2}{m} t\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x} + \frac{\hbar}{2i}\psi\psi^*\right)\delta v,$$

$$\delta\Omega_t = -\frac{\hbar}{i} t\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^*\,\delta v.$$

[Daß die Funktionen Ω_μ auch Ableitungen der Feldfunktionen enthalten können, wird durch die Fußnote [2]) auf S. 417 — ausgedehnt auf das mehrdimensionale Variationsproblem — gerechtfertigt.]

Die Gl. (1.7–35) ergibt die Erhaltungsgröße

$$m\int \psi^* x\,\psi\,d^3x - \frac{\hbar}{i} t\int \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\,d^3x = \text{const}.$$

Dieses Ergebnis läßt sich auf alle Raumrichtungen erweitern. Man erhält mit der Definition (1.4–22) den Schwerpunktsatz

$$\mathfrak{R}(t) - t\frac{\mathfrak{P}}{M} = \text{const} = \mathfrak{R}(0) \tag{e}$$

für ein kräftefreies Feld. Da diese Beziehung — ebenso wie Gl. (1.2–45c) in der Punktmechanik — aus der Invarianz gegen GALILEI-Transformation folgt, ist es sinnvoll, den Ausdruck (1.4–22) als *Feldschwerpunkt* zu interpretieren.

24, S. 105: Der gesamte Feldimpuls ist nach Gl. (1.7–17)

$$P_\alpha[\psi_j, \pi_j] = \int p_\alpha \, d^3x = -\int \pi_j \, \partial_\alpha \psi_j \, d^3x \qquad (\alpha = 1, 2, 3)$$

ein Funktional von ψ_j und π_j. Für die Funktionalableitungen nach π_j und ψ_j ergibt Gl. (5.2–14 u. 15)

$$\frac{\delta P_\alpha}{\delta \pi_j} = \frac{\partial p_\alpha}{\partial \pi_j} = -\,\partial_\alpha \psi_j$$

und

$$\frac{\delta P_\alpha}{\delta \psi_j} = -\,\partial_\beta \frac{\partial p_\alpha}{\partial \partial_\beta \psi_j} = \partial_\alpha \pi_j .$$

Es gilt also

$$\operatorname{grad} \psi_j = -\frac{\delta \mathfrak{P}}{\delta \pi_j} \qquad \text{und} \qquad \operatorname{grad} \pi_j = \frac{\delta \mathfrak{P}}{\delta \psi_j},$$

in Analogie zu Gl. (1.7–78).

25, S. 109: Aus den Gleichungen (1.7–94) u. (5.2–13) folgt

$$\{h(\mathfrak{r}), \psi(\mathfrak{r}')\} = \frac{\delta h(\mathfrak{r})}{\delta \pi(\mathfrak{r}')} = \frac{\partial h}{\partial \pi} \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}') + \frac{\partial h}{\partial \partial_\alpha \pi} \partial_\alpha \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}').$$

Für das SCHRÖDINGER-Feld ist $h(\mathfrak{r})$ durch Gl. (1.7–70) gegeben, so daß man erhält

$$\{h(\mathfrak{r}), \psi(\mathfrak{r}')\} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} V(\mathfrak{r}) \psi(\mathfrak{r}) \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}') + \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}} \operatorname{grad} \psi(\mathfrak{r}) \operatorname{grad} \delta(\mathfrak{r} - \mathfrak{r}').$$

Die Ortsintegration liefert

$$\{H, \psi(\mathfrak{r}')\} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} V(\mathfrak{r}') \psi(\mathfrak{r}') - \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}} \Delta \psi(\mathfrak{r}').$$

Dieser Ausdruck ist nach Gl. (1.7–100$_1$) die Zeitableitung $\dot{\psi}$, so daß wieder die SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung resultiert.

****26,*** S. 109: Für ein Funktional $F[\psi_j, \pi_j]$, das auch noch explizit — d. h. bei festgehaltenem ψ_j, π_j — von $\mathfrak{r}$ abhängen kann, ergibt sich nach der Kettenregel für den gesamten räumlichen Gradienten, wenn man die Ergebnisse der Aufg. 24 berücksichtigt,

$$\begin{aligned} \operatorname{grad} F &= \sum_j \int \left(\frac{\delta F}{\delta \psi_j} \operatorname{grad} \psi_j + \frac{\delta F}{\delta \pi_j} \operatorname{grad} \pi_j \right) d^3x + (\operatorname{grad} F)_{\mathrm{ex}} \\ &= -\sum_j \int \left(\frac{\delta \mathfrak{P}}{\delta \pi_j} \frac{\delta F}{\delta \psi_j} - \frac{\delta F}{\delta \pi_j} \frac{\delta \mathfrak{P}}{\delta \psi_j} \right) d^3x + (\operatorname{grad} F)_{\mathrm{ex}}, \end{aligned}$$

oder nach Gl. (1.7–92)

$$\boxed{\operatorname{grad} F = -\{\mathfrak{P}, F\} + (\operatorname{grad} F)_{\mathrm{ex}}}\,. \tag{a}$$

Dieses Ergebnis läßt sich mit der Beziehung (1.7–99) in vierdimensionaler Schreibweise vereinen, wenn man den integralen Viererimpuls [vgl. Gl. (1.7–15)]

$$P_\mu = \left(P_\alpha, \frac{\mathrm{i}}{c} H \right) = \frac{1}{\mathrm{i}c} \int \theta_{4\mu} \, d^3x \qquad \begin{matrix} (\mu = 1, 2, 3, 4) \\ (\alpha = 1, 2, 3) \end{matrix}$$

benutzt,

$$\boxed{\frac{\partial F}{\partial x_\mu} = -\{P_\mu, F\} + \left(\frac{\partial F}{\partial x_\mu}\right)_{\text{ex}}}\,. \tag{b}$$

Identifiziert man in Gl. (a) die Größe F mit ψ_j bzw. π_j, so erhält man

$$\operatorname{grad}\psi_j = -\{\mathfrak{P}, \psi_j\} \quad \text{und} \quad \operatorname{grad}\pi_j = -\{\mathfrak{P}, \pi_j\}, \tag{c}$$

das räumliche Analogon zu Gl. (1.7–100).

Für eine *integrale* Feldgröße F, die durch örtliche Integration über eine Dichte entsteht, ist natürlich $\operatorname{grad} F = 0$, d. h., es gilt dann

$$0 = -\{\mathfrak{P}, F\} + (\operatorname{grad} F)_{\text{ex}}. \tag{d}$$

Setzt man insbesondere für F eine Komponente X_β ($\beta = 1, 2, 3$) des Feldschwerpunktes [Gl. (1.4–22)] ein und berücksichtigt man, daß für die Komponenten von $(\operatorname{grad} X_\beta)_{\text{ex}}$ gilt

$$\left(\frac{\partial X_\beta}{\partial x_\alpha}\right)_{\text{ex}} = \frac{1}{N}\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\int \psi^* x_\beta \psi \, \mathrm{d}^3x\right)_{\psi^*,\psi} = \frac{1}{N}\int \psi^*\psi \, \mathrm{d}^3x \cdot \delta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta},$$

so folgt aus (d)

$$\boxed{\{P_\alpha, X_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}}\,. \tag{e}$$

Zwischen den Komponenten des Feldimpulses und des Feldschwerpunktes gelten also dieselben POISSON-Klammer-Relationen wie zwischen Impuls und Ort der Teilchenmechanik.

27, S. 112: Die Parallelität zweier Vektoren $|\chi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ bedeutet $|\chi\rangle = c\,|\varphi\rangle$. Da $|\chi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ Einheitsvektoren sein sollen, gilt

$$1 = \langle\chi\,|\,\chi\rangle = \langle c\varphi\,|\,c\varphi\rangle = |c|^2\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle = |c|^2,$$

d. h.,

$$c = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma} \qquad (\gamma = \text{reell}).$$

Das Skalarprodukt zweier paralleler Einheitsvektoren des unitären Raumes ist daher

$$\langle\varphi\,|\,\chi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}.$$

[Im Reellen ist nur $\gamma = 0$ oder π (parallel oder antiparallel) möglich.]

28, S. 119: a)

$$\begin{aligned}\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle &= \frac{1}{2}\langle v_1 + \mathrm{i}v_2\,|\,v_1 + \mathrm{i}v_2\rangle \\ &= \frac{1}{2}(\langle v_1| - \mathrm{i}\langle v_2|)(|v_1\rangle + \mathrm{i}\,|v_2\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(\langle v_1\,|\,v_1\rangle + \mathrm{i}\langle v_1\,|\,v_2\rangle - \mathrm{i}\langle v_2\,|\,v_1\rangle + \langle v_2\,|v_2\rangle).\end{aligned}$$

Wegen $\langle v_i\,|\,v_k\rangle = \delta_{ik}$ ergibt sich $\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle = 1$. Zu diesem Ergebnis führt natürlich auch Gl. (2.1–31): $\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle = \frac{1}{2}(1\cdot 1 + \mathrm{i}^*\mathrm{i}) = 1$. Durch eine analoge Rechnung findet man $\langle\chi\,|\,\chi\rangle = 1$ und $\langle\varphi\,|\,\chi\rangle = \frac{1}{2}(1\cdot 1 + \mathrm{i}^*(-\mathrm{i})) = 0$, d. h. die Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ sind orthonormiert.

b) $$\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle = \int\int_a^b e^{-ik}\langle v_k\,|\,v_{k'}\rangle\, e^{ik'}\,dk\,dk'.$$

Wegen $\langle v_k\,|\,v_{k'}\rangle = \delta(k-k')$ ergibt sich

$$\langle\varphi\,|\,\varphi\rangle = \int_a^b dk = b-a, \qquad \|\varphi\| = \sqrt{b-a}$$

und analog

$$\langle\chi\,|\,\chi\rangle = b-a, \qquad \|\chi\| = \sqrt{b-a}\,.$$

Für das Skalarprodukt $\langle\varphi\,|\,\chi\rangle$ erhält man

$$\langle\varphi\,|\,\chi\rangle = \int\int_a^b e^{-ik}\langle v_k\,|\,v_{k'}\rangle\, e^{2ik'}\,dk\,dk'$$
$$= \int_a^b e^{ik}\,dk = \frac{1}{i}(e^{ib}-e^{ia}).$$

$|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$ sind orthogonal, falls $b-a = 2\pi n$ (n ganz) ist.

29, S. 124: Wegen Gl. (2.2–7_7) folgt aus $[\mathscr{M},\mathscr{L}] = \mathscr{O}$

$$[\mathscr{M},\mathscr{L}^n] = [\mathscr{M},\mathscr{L}^{n-1}]\,\mathscr{L} + \mathscr{L}^{n-1}[\mathscr{M},\mathscr{L}] = [\mathscr{M},\mathscr{L}^{n-1}]\,\mathscr{L}$$
$$= [\mathscr{M},\mathscr{L}^{n-2}]\,\mathscr{L}^2 = \cdots = [\mathscr{M},\mathscr{L}]\,\mathscr{L}^{n-1} = \mathscr{O}.$$

Mit Gl. (2.2–7_5) ergibt sich damit auch für eine Potenzreihe $\mathscr{F}(\mathscr{L})$

$$[\mathscr{M},\mathscr{F}(\mathscr{L})] = \mathscr{O}.$$

****30,*** S. 124: Wir entwickeln den Operator $\mathscr{F}(\alpha) = e^{\alpha\mathscr{L}}\,\mathscr{M}\,e^{-\alpha\mathscr{L}}$ in eine TAYLOR-Reihe nach Potenzen des Parameters α

$$\mathscr{F}(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{d^n\mathscr{F}}{d\alpha^n}\right)_{\alpha=0}\alpha^n.$$

Zur Berechnung der Differentialquotienten berücksichtigen wir, daß aus Gl. (2.2–11a)

$$\frac{d}{d\alpha}(\mathscr{A}(\alpha)\,\mathscr{B}(\alpha)) = \frac{d\mathscr{A}}{d\alpha}\mathscr{B} + \mathscr{A}\frac{d\mathscr{B}}{d\alpha} \qquad \text{(Reihenfolge!)}$$

und aus Gl. (2.2–10)

$$\frac{d}{d\alpha}e^{\alpha\mathscr{L}} = \mathscr{L}\,e^{\alpha\mathscr{L}} = e^{\alpha\mathscr{L}}\,\mathscr{L}$$ [1]

[1] Man beachte aber, daß z. B.

$$\frac{d}{d\alpha}(e^{\alpha x+\beta p}) \neq x\,e^{\alpha x+\beta p} \neq e^{\alpha x+\beta p}\,x$$

ist, wenn $[p, x] \neq \mathscr{O}$. Man sieht dies sofort, wenn man die Exponentialfunktion bis zum quadratischen Glied entwickelt. — Für $[p, x] = \frac{\hbar}{i}\mathbb{1}$ [vgl. Gl. (3.2–10)] folgt etwa aus Gl. (2.2–16)

$$\frac{d}{d\alpha}(e^{\alpha x+\beta p}) = \frac{d}{d\alpha}\left(e^{\alpha x}\,e^{\beta p}\,e^{\frac{\hbar}{2i}\alpha\beta\mathbb{1}}\right) = \left(x + \frac{\hbar}{2i}\beta\,\mathbb{1}\right)e^{\alpha x}\,e^{\beta p}\,e^{\frac{\hbar}{2i}\alpha\beta\mathbb{1}}$$
$$= \left(x + \frac{\hbar}{2i}\beta\,\mathbb{1}\right)e^{\alpha x+\beta p}.$$

folgt. Wir erhalten

$$\frac{d}{d\alpha}\mathcal{F} = e^{\alpha\mathcal{L}}\,\mathcal{L}\,\mathcal{M}\,e^{-\alpha\mathcal{L}} - e^{\alpha\mathcal{L}}\,\mathcal{M}\,\mathcal{L}\,e^{-\alpha\mathcal{L}} = e^{\alpha\mathcal{L}}\,[\mathcal{L},\mathcal{M}]\,e^{-\alpha\mathcal{L}},$$

$$\frac{d^2}{d\alpha^2}\mathcal{F} = \frac{d}{d\alpha}\left(e^{\alpha\mathcal{L}}\,[\mathcal{L},\mathcal{M}]\,e^{-\alpha\mathcal{L}}\right) = e^{\alpha\mathcal{L}}\,[\mathcal{L},[\mathcal{L},\mathcal{M}]]\,e^{-\alpha\mathcal{L}},$$

usw. Damit ist

$$\mathcal{F}(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\,[\mathcal{L},\mathcal{M}]_{(n)}\,\alpha^n.$$

Setzt man $\alpha = 1$, so folgt die zu beweisende Beziehung.

***31,** S. 125: Wir setzen $\mathcal{F}(\alpha) = e^{\alpha(\mathcal{L}+\mathcal{M})}$ und erhalten aus Gl. (2.2–15) und den gemachten Voraussetzungen

$$\mathcal{F}\,\mathcal{L}\,\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{L} + \alpha[\mathcal{M},\mathcal{L}]$$

oder

$$\mathcal{F}\,\mathcal{L} = \mathcal{L}\,\mathcal{F} - \alpha[\mathcal{L},\mathcal{M}]\,\mathcal{F}.$$

Andererseits ergibt sich bei Differentiation von $\mathcal{F}$ nach α

$$\frac{d\mathcal{F}}{d\alpha} = \mathcal{F}(\mathcal{L}+\mathcal{M}) = \mathcal{L}\,\mathcal{F} + \mathcal{F}\,\mathcal{M} - \alpha[\mathcal{L},\mathcal{M}]\,\mathcal{F}.$$

Diese Gleichung besitzt das Integral

$$\mathcal{F}(\alpha) = e^{\alpha\mathcal{L}}\,e^{\alpha\mathcal{M}}\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2[\mathcal{L},\mathcal{M}]},$$

was man durch Differentiation sofort verifiziert, wenn man die getroffenen Voraussetzungen berücksichtigt (vgl. Aufg. 29). Für $\alpha = 1$ resultiert die gesuchte Relation (2.2–16).

32, S. 128:

$$\langle v_k \,|\, 1\, v_{k'}\rangle = \langle v_k \,|\, v_{k'}\rangle = \delta(k, k').$$

33, S. 128: Schiebt man zwischen $\mathcal{L}$ und $\mathcal{M}$ die Zerlegung des Einheitsoperators [Gl. (2.2–20] ein, so erhält man

$$\langle v_k \,|\, \mathcal{L}\,\mathcal{M}\, v_{k'}\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k''} \langle v_k \,|\, \mathcal{L}\, v_{k''}\rangle \langle v_{k''} \,|\, \mathcal{M}\, v_{k'}\rangle\, dk''$$

$$= \mathop{\sum\!\!\!\!\int}_{k''} L(k, k'')\, M(k'', k')\, dk''.$$

34, S. 128: Setzen wir in Gl. (2.2–26) für

$$v(x, k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{ikx} \qquad (-\infty < k < +\infty,\ -\infty < x < +\infty),$$

so erhalten wir

$$L(x', x) = \frac{1}{2\pi}\iint_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k'x'-kx)}\, L(k', k)\, dk'\, dk.$$

a) **Für**

$$L(k', k) = A(k')\,\delta(k' - k)$$

folgt

$$L(x', x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\, e^{ik(x'-x)}\, dk.$$

b) Für

$$L(k', k) = \frac{d}{dk'}\, \delta(k' - k)$$

gibt nach Gl. (5.1–29) die Integration über k'

$$L(x', x) = -\frac{ix'}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x'-x)}\, dk = -ix'\, \delta(x' - x).$$

35, S. 128: Setzt man an Stelle von Gl. (2.2–28a) die Matrixelemente

$$L_{\sigma'\sigma}(k', k) = A_{\sigma'\sigma}(k')\, \delta(k' - k) + B_{\sigma'\sigma}(k')\, \delta'(k' - k) + \cdots$$

in Gl. (2.2—27) ein,

$$\mathscr{L}\, \varphi_{\sigma'}(k') = \sum_{\sigma} \int_{k} L_{\sigma'\sigma}(k', k)\, \varphi_{\sigma}(k)\, dk,$$

so ergibt sich

$$\mathscr{L}\, \varphi_{\sigma'}(k) = \sum_{\sigma} \left[A_{\sigma'\sigma}(k) + B_{\sigma'\sigma}(k) \frac{d}{dk} + \cdots \right] \varphi_{\sigma}(k);$$

also z. B. für eine 2-komponentige Funktion $\varphi_{\sigma}(k)$

$$\mathscr{L}\, \varphi_1(k) = \left[A_{11}(k) + B_{11}(k) \frac{d}{dk} + \cdots \right] \varphi_1(k) + \left[A_{12}(k) + B_{12}(k) \frac{d}{dk} + \cdots \right] \varphi_2(k),$$

$$\mathscr{L}\, \varphi_2(k) = \left[A_{21}(k) + B_{21}(k) \frac{d}{dk} + \cdots \right] \varphi_1(k) + \left[A_{22}(k) + B_{22}(k) \frac{d}{dk} + \cdots \right] \varphi_2(k).$$

Eine solche diskrete Variable σ wird z. B. für die Beschreibung des Spins benötigt (vgl. 4.3 § 4).

36, S. 128: Durch zweimaliges Einschieben von

$$1 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{x} |u_x\rangle \langle u_x|\, dx$$

folgt

$$\mathrm{Sp}\, \mathscr{L} = \mathrm{Sp}\, 1\, \mathscr{L}\, 1 = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{k,x,x'} \langle v_k \mid u_x\rangle \langle u_x \mid \mathscr{L}\, u_{x'}\rangle \langle u_{x'} \mid v_k\rangle\, dk\, dx\, dx'.$$

Die Summe über k ergibt $\delta(x, x')$, so daß man erhält

$$\mathrm{Sp}\, \mathscr{L} = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{x} \langle u_x \mid \mathscr{L}\, u_x\rangle\, dx = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\int}_{x} L(x, x)\, dx,$$

d. h., die Spur ist unabhängig von der zugrunde gelegten Basis.

37, S. 128: $$\mathrm{Sp}\,(\mathscr{L}\,\mathscr{M}) = \mathrm{Sp}\,(\mathscr{L}\,\mathbf{1}\,\mathscr{M})$$
$$= \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k,k'} \langle v_k \mid \mathscr{L}\, v_{k'}\rangle \langle v_{k'} \mid \mathscr{M}\, v_k\rangle \,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k'$$
$$= \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k,k'} \langle v_{k'} \mid \mathscr{M}\, v_k\rangle \langle v_k \mid \mathscr{L}\, v_{k'}\rangle \,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}k'$$
$$= \mathop{\mathrm{S}\!\!\!\int}_{k'} \langle v_{k'} \mid \mathscr{M}\,\mathscr{L}\, v_{k'}\rangle \,\mathrm{d}k' = \mathrm{Sp}\,\mathscr{M}\,\mathscr{L}\,.$$

$\mathrm{Sp}(\mathscr{L}\,\mathscr{M}) = \mathrm{Sp}(\mathscr{M}\,\mathscr{L})$ gilt also auch dann, wenn $[\mathscr{L},\mathscr{M}] \neq \mathit{0}$ ist. Es folgt, daß man unter der Spur die Operatoren zyklisch vertauschen darf, z. B.

$$\mathrm{Sp}(\mathscr{L}\,\mathscr{M}\,\mathscr{N}) = \mathrm{Sp}(\mathscr{N}\,\mathscr{L}\,\mathscr{M}) = \mathrm{Sp}(\mathscr{M}\,\mathscr{N}\,\mathscr{L})\,.$$

38, S. 134: *Gln.* (2.2–39): Aus
$$\langle \chi \mid \mathscr{L}^{\dagger\dagger}\,\varphi\rangle = \langle \mathscr{L}^{\dagger}\,\chi \mid \varphi\rangle = \langle \chi \mid \mathscr{L}\,\varphi\rangle$$
folgt
$$\mathscr{L}^{\dagger\dagger} = \mathscr{L}\,.$$
Aus
$$\langle \chi \mid (a\,\mathscr{L})^{\dagger}\,\varphi\rangle = \langle a\,\mathscr{L}\,\chi \mid \varphi\rangle = a^*\,\langle \mathscr{L}\,\chi \mid \varphi\rangle = a^*\,\langle \chi \mid \mathscr{L}^{\dagger}\,\varphi\rangle = \langle \chi \mid a^*\,\mathscr{L}^{\dagger}\varphi\rangle$$
folgt
$$(a\,\mathscr{L})^{\dagger} = a^*\,\mathscr{L}^{\dagger}\,.$$
Aus
$$\langle \chi \mid (\mathscr{L} + \mathscr{M})^{\dagger}\,\varphi\rangle = \langle (\mathscr{L} + \mathscr{M})\,\chi \mid \varphi\rangle = \langle \mathscr{L}\,\chi \mid \varphi\rangle + \langle \mathscr{M}\,\chi \mid \varphi\rangle$$
$$= \langle \chi \mid \mathscr{L}^{\dagger}\,\varphi\rangle + \langle \chi \mid \mathscr{M}^{\dagger}\,\varphi\rangle$$
folgt
$$(\mathscr{L} + \mathscr{M})^{\dagger} = \mathscr{L}^{\dagger} + \mathscr{M}^{\dagger}.$$
Aus
$$\langle \chi \mid (\mathscr{L}\,\mathscr{M})^{\dagger}\,\varphi\rangle = \langle \mathscr{L}\,\mathscr{M}\,\chi \mid \varphi\rangle = \langle \mathscr{M}\,\chi \mid \mathscr{L}^{\dagger}\,\varphi\rangle = \langle \chi \mid \mathscr{M}^{\dagger}\,\mathscr{L}^{\dagger}\,\varphi\rangle$$
folgt
$$(\mathscr{L}\,\mathscr{M})^{\dagger} = \mathscr{M}^{\dagger}\,\mathscr{L}^{\dagger}\,.$$
Mit $\mathscr{M} = \mathscr{L}^{-1}$ folgt wegen $\mathbf{1} = \mathbf{1}^{\dagger}$
$$\mathbf{1} = (\mathscr{L}\,\mathscr{L}^{-1})^{\dagger} = (\mathscr{L}^{-1})^{\dagger}\,\mathscr{L}^{\dagger}, \quad \text{d. h.} \quad (\mathscr{L}^{-1})^{\dagger} = (\mathscr{L}^{\dagger})^{-1}\,.$$
Gln. (2.2–45): $\mathscr{H} = \mathscr{H}^{\dagger}$, $\mathscr{K} = \mathscr{K}^{\dagger}$. Aus den Gln. (2.2–39) folgt
$$(\mathscr{H} + \mathscr{K})^{\dagger} = \mathscr{H}^{\dagger} + \mathscr{K}^{\dagger} = \mathscr{H} + \mathscr{K},$$
$$(a\,\mathscr{H})^{\dagger} = a^*\,\mathscr{H}^{\dagger} = a^*\,\mathscr{H} = a\,\mathscr{H}, \text{ falls } a \text{ reell},$$
$$(\mathscr{H}^n)^{\dagger} = (\mathscr{H}\,\mathscr{H}\ldots)^{\dagger} = \mathscr{H}^{\dagger}\,\mathscr{H}^{\dagger}\ldots = \mathscr{H}\,\mathscr{H}\ldots = \mathscr{H}^n,$$
$$(\mathscr{H}^{-1})^{\dagger} = (\mathscr{H}^{\dagger})^{-1} = \mathscr{H}^{-1},$$
also
$$(\mathscr{H}^n)^{\dagger} = \mathscr{H}^n \text{ für positive und negative ganze } n,$$
$$\Big(\sum_n a^n\,\mathscr{H}^n\Big)^{\dagger} = \sum_n a^{n*}\,\mathscr{H}^{n\dagger} = \sum a^n\,\mathscr{H}^n, \text{ falls } a^n \text{ reell},$$
$$(\mathscr{H}\,\mathscr{K} + \mathscr{K}\,\mathscr{H})^{\dagger} = \mathscr{K}\,\mathscr{H} + \mathscr{H}\,\mathscr{K} = \mathscr{H}\,\mathscr{K} + \mathscr{K}\,\mathscr{H},$$
$$(\mathscr{H}\,\mathscr{K})^{\dagger} = \mathscr{K}\,\mathscr{H} = \mathscr{H}\,\mathscr{K}, \text{ falls } \mathscr{H} \text{ mit } \mathscr{K} \text{ vertauscht},$$
$$\{\mathrm{i}(\mathscr{H}\,\mathscr{K} - \mathscr{K}\,\mathscr{H})\}^{\dagger} = -\mathrm{i}(\mathscr{K}\,\mathscr{H} - \mathscr{H}\,\mathscr{K}) = \mathrm{i}(\mathscr{H}\,\mathscr{K} - \mathscr{K}\,\mathscr{H}),$$
$$(\mathscr{A}\,\mathscr{H}\,\mathscr{A}^{\dagger})^{\dagger} = \mathscr{A}^{\dagger\dagger}\,\mathscr{H}^{\dagger}\,\mathscr{A}^{\dagger} = \mathscr{A}\,\mathscr{H}\,\mathscr{A}^{\dagger},$$
$$\left(\frac{\mathrm{d}\mathscr{H}(t)}{\mathrm{d}t}\right)^{\dagger} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\mathscr{H}^{\dagger}(t+\varepsilon) - \mathscr{H}^{\dagger}(t)}{\varepsilon} = \frac{\mathrm{d}\mathscr{H}(t)}{\mathrm{d}t}\,,$$
falls $\mathscr{H}$ für alle t HERMITEsch ist.

Gln. (2.2–50): $\mathscr{U}^\dagger = \mathscr{U}^{-1}$, $\mathscr{V}^\dagger = \mathscr{V}^{-1}$. Aus den Gln. (2.2–39) folgt

$$(a\,\mathscr{U})^\dagger = a^*\,\mathscr{U}^{-1} = a^{-1}\,\mathscr{U}^{-1},\ \text{falls } a^*\,a = 1,$$

$$(\mathscr{U}^n)^\dagger = (\mathscr{U}^\dagger)^n = \mathscr{U}^{-n} = (\mathscr{U}^n)^{-1},$$

$$(\mathscr{U}\,\mathscr{V})^\dagger = \mathscr{V}^\dagger\,\mathscr{U}^\dagger = \mathscr{V}^{-1}\,\mathscr{U}^{-1} = (\mathscr{U}\,\mathscr{V})^{-1},$$

$$\left(\mathrm{i}\,\frac{\mathscr{U} - \mathit{1}}{\mathscr{U} + \mathit{1}}\right)^\dagger = -\,\mathrm{i}\,\frac{\mathscr{U}^\dagger - \mathit{1}}{\mathscr{U}^\dagger + \mathit{1}} = -\,\mathrm{i}\,\frac{\mathscr{U}^{-1} - \mathit{1}}{\mathscr{U}^{-1} + \mathit{1}} = -\,\mathrm{i}\,\frac{\mathit{1} - \mathscr{U}}{\mathit{1} + \mathscr{U}} = \mathrm{i}\,\frac{\mathscr{U} - \mathit{1}}{\mathscr{U} + \mathit{1}}\,. \quad [1]$$

Gln. (2.2–51): $\mathscr{U}^\dagger = \mathscr{U}^{-1}$, $\mathscr{H}^\dagger = \mathscr{H}$:

$$(\mathscr{U}\,\mathscr{H}\,\mathscr{U}^{-1})^\dagger = \mathscr{U}\,\mathscr{H}\,\mathscr{U}^{-1}\ \ [\text{folgt auch aus Gl. } (2.2\text{–}45_8)],$$

$$(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathscr{H}})^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,(-\mathrm{i}\,\mathscr{H})^n = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathscr{H}} = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathscr{H}})^{-1},$$

$$\left(\frac{\mathit{1} - \mathrm{i}\,\mathscr{H}}{\mathit{1} + \mathrm{i}\,\mathscr{H}}\right)^\dagger = \frac{\mathit{1} + \mathrm{i}\,\mathscr{H}}{\mathit{1} - \mathrm{i}\,\mathscr{H}} = \left(\frac{\mathit{1} - \mathrm{i}\,\mathscr{H}}{\mathit{1} + \mathrm{i}\,\mathscr{H}}\right)^{-1}. \quad [1]$$

Löst man $\mathscr{U} = \dfrac{\mathit{1} - \mathrm{i}\,\mathscr{H}}{\mathit{1} + \mathrm{i}\,\mathscr{H}}$ (CAYLEY-Transformation) nach $\mathscr{H}$ auf, so erhält man die Aussage von Gl. (2.2–50_4).

39, S. 134: Nach Aufg. 37 ist

$$\mathrm{Sp}\,\mathscr{A}\,\mathscr{F}\,\mathscr{A}^{-1} = \mathrm{Sp}\,\mathscr{A}^{-1}\,\mathscr{A}\,\mathscr{F} = \mathrm{Sp}\,\mathscr{F}.$$

40, S. 134: Aus Gl. (2.2–43) folgt, daß eine n-dimensionale HERMITEsche Matrix n reelle Diagonalelemente und $n(n-1)/2$ komplexe Außerdiagonalelemente mit $k > k'$ hat. Letztere sind zu jenen mit $k < k'$ konjugiert komplex. Insgesamt besitzt eine HERMITEsche Matrix also $n + 2\,\dfrac{n(n-1)}{2} = n^2$ unabhängige *reelle* Parameter.

Die Gln. (2.2–49) stellen für $k = k'$ n reelle Bedingungsgleichungen und für $k > k'$ $n(n-1)/2$ komplexe Gleichungen dar. Für $k < k'$ sind die Gleichungen konjugiert komplex zu jenen mit $k > k'$ und liefern daher keine weiteren Einschränkungen. Insgesamt existieren also $n + n(n-1) = n^2$ reelle Bedingungen für n^2 komplexe oder $2n^2$ reelle Matrixelemente, d. h., auch eine unitäre Matrix besitzt n^2 unabhängige *reelle* Parameter.

41, S. 134: Die zu $\boldsymbol{U} = \dfrac{1}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2}} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}$ adjungierte Matrix $\boldsymbol{U}^\dagger$ erhält man durch Vertauschung von Zeilen und Spalten und Übergang zum Konjugiert-Komplexen

$$\boldsymbol{U}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2}} \begin{pmatrix} \alpha^* & -\beta \\ \beta^* & \alpha \end{pmatrix}.$$

Die Matrizenmultiplikation $\boldsymbol{U}\,\boldsymbol{U}^\dagger$ (vgl. Aufg. 33) ergibt

$$\frac{1}{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \begin{pmatrix} |\alpha|^2 + |\beta|^2 & 0 \\ 0 & |\alpha|^2 + |\beta|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1},$$

d. h. $\boldsymbol{U}^\dagger = \boldsymbol{U}^{-1}$, $\boldsymbol{U}$ ist unitär.

---

[1] Die Schreibweise $\dfrac{\mathscr{X} - \mathit{1}}{\mathscr{X} + \mathit{1}}$ ist angebracht, weil $(\mathscr{X} - \mathit{1})$ mit $(\mathscr{X} + \mathit{1})^{-1}$ vertauscht. Nach Gl. (2.2–34) ist nämlich

$$(\mathscr{X} + \mathit{1})\,(\mathscr{X} - \mathit{1})\,(\mathscr{X} + \mathit{1})^{-1} = (\mathscr{X} + \mathit{1})\,\mathscr{X}\,(\mathscr{X} + \mathit{1})^{-1} - (\mathscr{X} + \mathit{1})\,(\mathscr{X} + \mathit{1})^{-1} = \mathscr{X} - \mathit{1}.$$

42, S. 134: Die Bedingung der HERMITEizität von p [Gl. (2.2–42)]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (p\,\chi(x))^* \varphi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^*(x)\,p\,\varphi(x)\,dx$$

liefert

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\chi^*}{dx}\,\varphi\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi^* \frac{d\varphi}{dx}\,dx$$

oder nach partieller Integration

$$\chi^*(x)\,\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0.$$

Für HILBERT-Raum-Vektoren $|\chi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ ist diese Bedingung erfüllt, weil deren Komponenten $\chi(x)$ und $\varphi(x)$ wegen der Quadratintegrabilität (2.1 § 5) im Unendlichen verschwinden.

43, S. 135: a) Durch Vergleich von

$$\langle\varphi\,|\,u\rangle\,\langle v\,|\,\chi\rangle = (\langle\chi\,|\,v\rangle\,\langle u\,|\,\varphi\rangle)^*$$

mit der Definition des adjungierten Operators

$$\langle\varphi\,|\,\mathscr{L}\,\chi\rangle = \langle\mathscr{L}^\dagger\,\varphi\,|\,\chi\rangle = \langle\chi\,|\,\mathscr{L}^\dagger\,\varphi\rangle^*$$

sieht man, daß gilt

$$(|u\rangle\,\langle v|)^\dagger = |v\rangle\,\langle u|. \tag{a}$$

Für den Projektionsoperator $|u\rangle\,\langle u|$ ergibt sich die HERMITEizität.

b) Aus

$$\mathscr{L}\,|\varphi\rangle = |\varphi\rangle + |u\rangle\,\langle v\,|\,\varphi\rangle = |\chi\rangle \tag{b}$$

folgt $\langle v\,|\,\varphi\rangle\,(1 + \langle v\,|\,u\rangle) = \langle v\,|\,\chi\rangle$, so daß wir für $|\varphi\rangle$ erhalten

$$|\varphi\rangle = |\chi\rangle - |u\rangle \frac{\langle v\,|\,\chi\rangle}{1 + \langle v\,|\,u\rangle} = \left(1 - \frac{|u\rangle\,\langle v|}{1 + \langle v\,|\,u\rangle}\right)|\chi\rangle,$$

d. h. (c)

$$\mathscr{L}^{-1} = (1 + |u\rangle\,\langle v|)^{-1} = 1 - \frac{|u\rangle\,\langle v|}{1 + \langle v\,|\,u\rangle}.$$

Für $1 + \langle v\,|\,u\rangle = 0$ existiert $\mathscr{L}^{-1}$ nicht. Dann ist $\langle v\,|\,\chi\rangle = 0$ und $|\varphi\rangle = |\chi\rangle + c\,|u\rangle$ mit willkürlichem c, wie man durch Einsetzen in Gl. (b) verifiziert.

Projiziert man Gl. (b) auf eine Basis $|w_x\rangle$ mit kontinuierlichem x im Intervall $a \leqq x \leqq b$, so erhält man

$$\langle w_x\,|\,\varphi\rangle + \langle w_x\,|\,u\rangle \int_a^b \langle v\,|\,w_{x'}\rangle\,\langle w_{x'}\,|\,\varphi\rangle\,dx' = \langle w_x\,|\,\chi\rangle. \tag{b_x}$$

Das ist die angegebene Integralgleichung, wenn man

$$\langle w_x\,|\,\varphi\rangle = \varphi(x),\quad \langle w_x\,|\,u\rangle = u(x),\quad \langle w_x\,|\,v\rangle = v(x),\quad \langle w_x\,|\,\chi\rangle = \chi(x)$$

setzt. Ihre Lösung $\varphi(x)$ liefert Gl. (c), projiziert auf $|w_x\rangle$,

$$\varphi(x) = \chi(x) - u(x)\,\frac{\int_a^b v^*(x')\,\chi(x')\,dx'}{1 + \int_a^b v^*(x')\,u(x')\,dx'}. \tag{c_x}$$

Verschwindet der Nenner, so ist $\varphi(x) = \chi(x) + c\,u(x)$ Lösung.

44, S. 135: Nein, weil durch $\mathcal{P}_{|u\rangle}\,|\varphi\rangle = |u\rangle\,\langle u\,|\,\varphi\rangle$ alle Vektoren $|\varphi\rangle$, für die $\langle u\,|\,\varphi\rangle$ gleich ist, auf denselben Vektor $|u\rangle\,\langle u\,|\,\varphi\rangle$ abgebildet werden (Fig. 36, S. 133). Die Umkehrung ist damit nicht eindeutig.

45, S. 135: Die Matrixelemente von $\mathcal{P}_{|u\rangle}$ sind nach Gl. (2.2–57)

$$\mathcal{P}_{|u\rangle}(k, k') = \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 & u_1 u_3 \\ u_2 u_1 & u_2^2 & u_2 u_3 \\ u_3 u_1 & u_3 u_2 & u_3^2 \end{pmatrix},$$

so daß die zugehörige Fläche 2. Ordnung nach Gl. (2.2–44) in den laufenden Koordinaten $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ lautet

$$u_1^2\varphi_1^2 + u_2^2\varphi_2^2 + u_3^2\varphi_3^2 + 2u_1u_2\varphi_1\varphi_2 + 2u_1u_3\varphi_1\varphi_3 + 2u_2u_3\varphi_2\varphi_3 = \text{const}$$

oder

$$(u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2 + u_3\varphi_3)^2 = \text{const}.$$

Sie besteht aus den beiden Ebenen $u_1\varphi_1 + u_2\varphi_2 + u_3\varphi_3 = \pm c$, die senkrecht auf dem Vektor $|u\rangle$ stehen (vgl. auch Fig. 43, S. 146).

46, S. 135: Wegen Gl. (2.2–62) ist $\mathcal{P}_{\mathfrak{u}_1} + \mathcal{P}_{\mathfrak{u}_2} = \mathit{1}$.
Alle Vektoren aus $\mathfrak{u}_1$ stehen senkrecht auf allen Vektoren aus $\mathfrak{u}_2$. Aus $\langle u_{\alpha_1}\,|\,u_{\alpha_2}\rangle = 0$ folgt daher

$$\mathcal{P}_{\mathfrak{u}_1}\,\mathcal{P}_{\mathfrak{u}_2} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha_1\alpha_2} |u_{\alpha_1}\rangle\,\langle u_{\alpha_1}\,|\,u_{\alpha_2}\rangle\,\langle u_{\alpha_2}\,|\,\mathrm{d}\alpha_1\,\mathrm{d}\alpha_2 = \mathit{0}.$$

47, S. 135: An Stelle der Vektoren $|u_\alpha\rangle$ führen wir andere orthonormierte Vektoren $|\tilde{u}_\beta\rangle$ ein, die ebenfalls den Teilraum $\mathfrak{u}$ aufspannen. Mit

$$|u_\alpha\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\beta} |\tilde{u}_\beta\rangle\,\langle\tilde{u}_\beta|\,u_\alpha\rangle\,\mathrm{d}\beta$$

folgt dann

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{\mathfrak{u}} &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha} |u_\alpha\rangle\,\langle u_\alpha|\,\mathrm{d}\alpha \\ &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha,\beta,\beta'} |\tilde{u}_\beta\rangle\,\langle\tilde{u}_\beta\,|\,u_\alpha\rangle\,\langle u_\alpha\,|\,\tilde{u}_{\beta'}\rangle\,\langle\tilde{u}_{\beta'}|\,\mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\beta' \\ &= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\beta,\beta'} |\tilde{u}_\beta\rangle\,\langle\tilde{u}_\beta|\,\mathcal{P}_{\mathfrak{u}}\,\tilde{u}_{\beta'}\rangle\,\langle\tilde{u}_{\beta'}|\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\beta'.\end{aligned}$$

Weil jedoch $\mathcal{P}_{\mathfrak{u}}$ auf alle Vektoren $|\tilde{u}_{\beta'}\rangle$ aus $\mathfrak{u}$ wie der Einheitsoperator wirkt, erhält man

$$\mathcal{P}_{\mathfrak{u}} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\beta,\beta'} |\tilde{u}_\beta\rangle\,\delta(\beta, \beta')\,\langle\tilde{u}_{\beta'}|\,\mathrm{d}\beta\,\mathrm{d}\beta' = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\beta} |\tilde{u}_\beta\rangle\,\langle\tilde{u}_\beta|\,\mathrm{d}\beta, \text{ q. e. d.}$$

48, S. 139: Die Komponenten $u_{k\lambda} = \langle v_k\,|\,u_\lambda\rangle$ der Eigenvektoren $|u_\lambda\rangle$

$$\mathcal{L}\,|u_\lambda\rangle = \Lambda_\lambda\,|u_\lambda\rangle$$

genügen nach Gl. (2.3–3a) dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned}(L_{11} - \Lambda_\lambda)\,u_{1\lambda} + L_{12}\,u_{2\lambda} &= 0, \\ L_{21}\,u_{1\lambda} + (L_{22} - \Lambda_\lambda)\,u_{2\lambda} &= 0.\end{aligned} \qquad \text{(a)}$$

Damit Lösungen $u_{k\lambda} \neq 0$ existieren, muß die Determinante der Koeffizienten verschwinden

$$\begin{vmatrix} L_{11} - \Lambda_\lambda & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} - \Lambda_\lambda \end{vmatrix} = 0,$$

oder

$$\Lambda_\lambda^2 - \Lambda_\lambda(L_{11} + L_{22}) + L_{11}L_{22} - L_{12}L_{21} = 0.$$

Die beiden Eigenwerte lauten daher

$$\Lambda_{1,2} = \frac{L_{11} + L_{22}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(L_{11} - L_{22})^2 + 4L_{12}L_{21}}\,. \tag{b}$$

Bei einer HERMITEschen Matrix ist $L_{11} = L_{22} =$ reell, und $L_{12} = L_{21}^*$. Man sieht direkt, daß dann die Eigenwerte reell werden. Ein zweifacher Eigenwert liegt vor, wenn die Wurzel verschwindet, also z. B. für $L_{11} = L_{22}$ und $L_{12} = 0$.

Für die Komponenten $u_{k\lambda}$ der beiden Eigenvektoren

$$|u_\lambda\rangle = |v_1\rangle\, u_{1\lambda} + |v_2\rangle\, u_{2\lambda}$$

liefert Gl. (a_1)

$$u_{2\lambda} = u_{1\lambda}\,\frac{\Lambda_\lambda - L_{11}}{L_{12}}\,.$$

Die Normierung $\langle u_\lambda | u_\lambda\rangle = 1$ ergibt (bis auf eine willkürliche Phase)

$$u_{1\lambda} = \left(1 + \left|\frac{\Lambda_\lambda - L_{11}}{L_{12}}\right|^2\right)^{-1/2}.$$

49, S. 139: Die Eigenwertgleichung

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\frac{\mathrm{d}u_p(x)}{\mathrm{d}x} = p\,u_p(x)$$

(p = Impulseigenwert) führt auf die Impulseigenfunktionen

$$\langle v_x \,|\, u_p\rangle = u_p(x) = C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\,.$$

Sie sind nicht quadratintegrabel. Die Eigenvektoren $|u_p\rangle$ sind Vektoren im DIRACschen Sinne

$$\langle u_p \,|\, u_{p'}\rangle = |C|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'-p)x}\,\mathrm{d}x = |C|^2\, 2\pi\hbar\, \delta(p' - p).$$

Sie können auf δ-Funktion normiert werden, wenn man

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

setzt. Die Eigenwerte p sind kontinuierlich, $-\infty < p < +\infty$ [vgl. Kap. 4.1].

Aus den $|u_p\rangle$ lassen sich normierte HILBERT-Raum-Vektoren $|u_{p,\Delta p}\rangle$ konstruieren, die näherungsweise Eigenvektoren von $\not p$ sind, wenn man entsprechend Gl. (2.3–6) über ein kleines Intervall $p \cdots p + \Delta p$ integriert und mit $\sqrt{\Delta p}$ dividiert. Für ihre Komponenten $\langle v_x \,|\, u_{p,\Delta p}\rangle = u_{p,\Delta p}(x)$ ergibt sich

$$u_{p,\Delta p}(x) = \frac{1}{\sqrt{\Delta p}} \int\limits_{p}^{p+\Delta p} u_{p'}(x)\,\mathrm{d}p' = 2\hbar\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p + \frac{\Delta p}{2}x\right)}\, \frac{\sin\frac{\Delta p}{2\hbar}x}{\sqrt{2\pi\hbar\,\Delta p}\,x}\,.$$

Für $\lim\limits_{\Delta p \to 0} \dfrac{u_{p,\Delta p}(x)}{\sqrt{\Delta p}}$ folgt natürlich wieder $u_p(x)$ [vgl. Gl. (2.1–18)].

50, S. 139: Aus $\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle$ folgt $\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle\langle u_\Lambda| = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle\langle u_\Lambda|$.

51, S. 139: Aus $\mathscr{L}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,|u_\Lambda\rangle$ folgt
a) $|u_\Lambda\rangle = \Lambda\,\mathscr{L}^{-1}\,|u_\Lambda\rangle$ oder $\mathscr{L}^{-1}\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda^{-1}\,|u_\Lambda\rangle$.
b) $\langle u_{\Lambda'}|\,\mathscr{L}^\dagger\,u_\Lambda\rangle = \langle \mathscr{L}\,u_{\Lambda'}\,|\,u_\Lambda\rangle = \Lambda'^*\,\delta(\Lambda',\Lambda) = \Lambda^*\,\delta(\Lambda',\Lambda)$, d. h. nach Gl. (2.2–22) $\mathscr{L}^\dagger\,|u_\Lambda\rangle = \Lambda^*\,|u_\Lambda\rangle$.

52, S. 140: Nach Aufg. 51 folgt aus $\mathscr{U}^\dagger = \mathscr{U}^{-1}$ für die Eigenwerte $\Lambda^* = \Lambda^{-1}$, d. h. $|\Lambda| = 1$ oder $\Lambda = e^{i\lambda}$ (λ = reell).

53, S. 150: Aus $\mathbf{1} = \underset{a,b}{\displaystyle\sum\!\!\!\!\!\int} |\overset{1}{\chi}_a\overset{2}{\chi}_b\rangle\langle\overset{1}{\chi}_a\overset{2}{\chi}_b|\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}b$ folgt

$$\langle \overset{1}{v}_k\overset{2}{v}_l\,|\,\varphi\rangle = \underset{a,b}{\sum\!\!\!\!\!\int} \langle \overset{1}{v}_k\overset{2}{v}_l\,|\,\overset{1}{\chi}_a\overset{2}{\chi}_b\rangle\langle\overset{1}{\chi}_a\overset{2}{\chi}_b\,|\,\varphi\rangle\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}b$$

oder nach Gl. (2.4–3)

$$\varphi(k,l) = \underset{a,b}{\sum\!\!\!\!\!\int} \overset{1}{\chi}_a(k)\,\overset{2}{\chi}_b(l)\,\varphi(a,b)\,\mathrm{d}a\,\mathrm{d}b.$$

54, S. 150: Ist

$$\boldsymbol{L}^1 = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{M}^2 = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix},$$

so lautet die Produktmatrix

$$\boldsymbol{L}^1 \times \boldsymbol{M}^2 = \begin{array}{c} \\ 11 \\ 12 \\ 21 \\ 22 \end{array} \begin{pmatrix} \overset{11}{L_{11}M_{11}} & \overset{12}{L_{11}M_{12}} & \overset{21}{L_{12}M_{11}} & \overset{22}{L_{12}M_{12}} \\ L_{11}M_{21} & L_{11}M_{22} & L_{12}M_{21} & L_{12}M_{22} \\ L_{21}M_{11} & L_{21}M_{12} & L_{22}M_{11} & L_{22}M_{12} \\ L_{21}M_{21} & L_{21}M_{22} & L_{22}M_{21} & L_{22}M_{22} \end{pmatrix}.$$

55, S. 164: Aus Gl. (2.2–7$_7$) folgt

$$\begin{aligned}[\mathscr{L},\mathscr{M}^n] &= [\mathscr{L},\mathscr{M}^{n-1}]\,\mathscr{M} + \mathscr{M}^{n-1}\,[\mathscr{L},\mathscr{M}] \\ &= [\mathscr{L},\mathscr{M}^{n-2}]\,\mathscr{M}^2 + \mathscr{M}^{n-2}[\mathscr{L},\mathscr{M}]\,\mathscr{M} + \mathscr{M}^{n-1}[\mathscr{L},\mathscr{M}] \\ &= \cdots = \sum_{\lambda=0}^{n-1} \mathscr{M}^\lambda\,[\mathscr{L},\mathscr{M}]\,\mathscr{M}^{n-\lambda-1}.\end{aligned}$$

Wegen Gl. (3.2–17 u. 18) gilt daher

$$[\mathscr{F},x^s] = +\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\sum_{\sigma=0}^{s-1} x^\sigma\,\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial p}\,x^{s-\sigma-1}$$

und

$$[\mathscr{F},p^r] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\sum_{\varrho=0}^{r-1} p^\varrho\,\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial x}\,p^{r-\varrho-1},$$

also insbesondere

$$[p^r,x^s] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,r\sum_{\sigma=0}^{s-1} x^\sigma\,p^{r-1}\,x^{s-\sigma-1} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,s\sum_{\varrho=0}^{r-1} p^\varrho\,x^{s-1}\,p^{r-\varrho-1}.$$

56, S. 165: $p^{-1}x - x\,p^{-1} = p^{-1}(x - p\,x\,p^{-1}) = p^{-1}\left\{x - \left(x\,p + \frac{\hbar}{i}\,1\right)p^{-1}\right\}$

$$= -\frac{\hbar}{i}\,p^{-2}.$$

Dasselbe Ergebnis erhält man, wenn man in Gl. (3.2–17) $\mathscr{F} = p^{-1}$ setzt.

57, S. 165: Es ist z. B.

$$[\ell_1, \vec{x}^2] = \sum_k ([\ell_1, x_k]\,x_k + x_k\,[\ell_1, x_k]) = \frac{\hbar}{i}\sum_k\left(\frac{\partial \ell_1}{\partial p_k}\,x_k + x_k\,\frac{\partial \ell_1}{\partial p_k}\right).$$

Nach Gl. (3.2–21$_1$) heben sich die einzelnen Beiträge gerade weg. Entsprechend findet man

$$[\ell_i, \vec{x}^2] = 0 \quad \text{und} \quad [\ell_i, \vec{p}^2] = 0.$$

Dies sind Spezialfälle des allgemeinen Satzes, wonach drehinvariante Operatoren mit den Drehimpulskomponenten vertauschen (3.6 § 6).

58, S. 171: $\overset{\circ\circ}{x} = \frac{i}{\hbar}[\mathscr{H}, \overset{\circ}{x}] + \left(\frac{\partial \overset{\circ}{x}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2[\mathscr{H}, [\mathscr{H}, x]] + \frac{i}{\hbar}\left[\left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t}\right)_{\text{ex}}, x\right].$

59, S. 171: a) Aus den Gln. (3.2–29 u. 4) und der Energieeigenwertgleichung

$$\mathscr{H}\,|u_E\rangle = E\,|u_E\rangle$$

folgt für die Matrixelemente

$$\langle u_E\,|\,\overset{\circ}{\mathscr{L}}\,u_{E'}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle u_E\,|\,(\mathscr{H}\,\mathscr{L} - \mathscr{L}\,\mathscr{H})\,u_{E'}\rangle + \langle u_E\,|\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} u_{E'}\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\langle\mathscr{H}\,u_E\,|\,\mathscr{L}\,u_{E'}\rangle - \langle u_E\,|\,\mathscr{L}\,\mathscr{H}\,u_{E'}\rangle) + \langle u_E|\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} u_{E'}\rangle,$$

$$\boxed{\langle u_E\,|\,\overset{\circ}{\mathscr{L}}\,u_{E'}\rangle = \frac{i}{\hbar}(E - E')\,\langle u_E\,|\,\mathscr{L}\,u_{E'}\rangle + \langle u_E|\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} u_{E'}\rangle}\,.$$

Die Diagonalelemente von $\overset{\circ}{\mathscr{L}}$ verschwinden also (bei diskretem E),

$$\langle u_E\,|\overset{\circ}{\mathscr{L}}\,u_E\rangle = 0, \quad \text{falls} \quad \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial t}\right)_{\text{ex}} = 0 \quad \text{ist.}$$

b) Aus $\vec{p} = m\,\overset{\circ}{\vec{x}} = \frac{i\,m}{\hbar}[\mathscr{H}, \vec{x}]$ und $\vec{\mathscr{K}} = \overset{\circ}{\vec{p}} = \frac{i}{\hbar}[\mathscr{H}, \vec{p}]$

$$\langle u_E\,|\,\vec{p}\,u_{E'}\rangle = \frac{i\,m}{\hbar}(E - E')\,\langle u_E\,|\,\vec{x}\,u_{E'}\rangle$$

und

$$\langle u_E\,|\,\vec{\mathscr{K}}\,u_{E'}\rangle = \frac{i}{\hbar}(E - E')\,\langle u_E\,|\,\vec{p}\,u_{E'}\rangle.$$

***60**, S. 171: Wegen $\langle u_a\,|\,e^{ikx}\,u_n\rangle^* = \langle u_n\,|\,e^{-ikx}\,u_a\rangle$ (k = reell) ist

$$S_1 = \sum_a\!\!\!\!\int E_a\,\langle u_n\,|\,e^{-ikx}\,u_a\rangle\,\langle u_a\,|\,e^{ikx}\,u_n\rangle\,da - E_n \sum_a\!\!\!\!\int \langle u_n\,|\,e^{-ikx}\,u_a\rangle\,\langle u_a\,|\,e^{ikx}\,u_n\rangle\,da.$$

Schließt man bei der Summation über a alle Entartungsindizes der Energieeigenvektoren $|u_a\rangle$ mit ein, so gilt

$$\mathop{\mathclap{\sum}\int}_a E_a\,|u_a\rangle\langle u_a|\,da = \mathcal{H} \quad\text{und}\quad \mathop{\mathclap{\sum}\int}_a |u_a\rangle\langle u_a|\,da = 1,$$

und man erhält

$$S_1 = \langle u_n\,|\,e^{-ikx}\,\mathcal{H}\,e^{ikx} - \mathcal{H}\,|u_n\rangle.$$

Nach Gl. (2.2–15) ist

$$e^{-ikx}\,p\,e^{ikx} = p - ik[x, p] = p + \hbar k\,1,$$

so daß Gl. (2.2–34) liefert

$$e^{-ikx}\,\mathcal{H}(x, p)\,e^{ikx} = \mathcal{H}(x, p + \hbar k\,1).$$

Für $\mathcal{H}(x, p) = \frac{1}{2m}p^2 + \mathcal{V}(x)$ folgt daher

$$S_1 = \frac{\hbar k}{m}\langle u_n\,|\,p\,u_n\rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Nach Aufg. 59b verschwindet aber der erste Term.

Um die Formel für S_2 zu beweisen, kann man entweder vom Ergebnis der Aufg. 59b ausgehen oder man entwickelt in S_1 den Operator $e^{ikx} = 1 + ik\,x + \cdots$ und erhält $S_1 = k^2 S_2$.

Diese Summenformeln sind für Abschätzungen der Matrixelemente — die etwa bei der Behandlung der Wechselwirkung zwischen Materie und elektromagnetischer Strahlung auftreten (vgl. 3.5 § 8) — von Bedeutung.

61, S. 171: An Stelle der klassischen Größe $\mathfrak{r}\mathfrak{p}$ tritt der Operator $\frac{1}{2}(\vec{x}\,\vec{p} + \vec{p}\,\vec{x})$. Gl. (3.2–32) liefert

$$\frac{1}{2}\overbrace{(\vec{x}\,\vec{p} + \vec{p}\,\vec{x})}^{\circ} = \frac{1}{2}(\overset{\circ}{\vec{x}}\,\vec{p} + \vec{x}\,\overset{\circ}{\vec{p}} + \overset{\circ}{\vec{p}}\,\vec{x} + \vec{p}\,\overset{\circ}{\vec{x}}) = \frac{1}{m}\vec{p}^{\,2} - \vec{x}\,\mathrm{grad}\,\mathcal{V}.$$

Ist das Potential $\mathcal{V}(\vec{x})$ homogen von Grad α, so ergibt sich

$$\frac{1}{2}\overbrace{(\vec{x}\,\vec{p} + \vec{p}\,\vec{x})}^{\circ} = 2\,\mathcal{T} - \alpha\,\mathcal{V}$$

($\mathcal{T} = \frac{1}{2m}\vec{p}^{\,2}$ = Operator der kinetischen Energie).

62, S. 180: Wegen $\mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}^{-1}$ ist

$$\langle\Phi'\,|\,\mathcal{L}'\,\Phi'\rangle = \langle\mathcal{A}\,\Phi\,|\,\mathcal{A}\,\mathcal{L}\,\mathcal{A}^{-1}\,\mathcal{A}\,\Phi\rangle = \langle\Phi\,|\,\mathcal{A}^{-1}\,\mathcal{A}\,\mathcal{L}\,\mathcal{A}^{-1}\,\mathcal{A}\,\Phi\rangle = \langle\Phi\,|\,\mathcal{L}\,\Phi\rangle.$$

Diese Invarianz erhält man auch sofort, wenn man in Gl. (3.3–24) die Invarianz der Spur gegen Ähnlichkeitstransformationen (Aufg. 39) berücksichtigt

$$\mathrm{Sp}(\mathcal{P}_{|\Phi'\rangle}\,\mathcal{L}') = \mathrm{Sp}(\mathcal{A}\,\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}\,\mathcal{L}\,\mathcal{A}^{-1}) = \mathrm{Sp}(\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}\,\mathcal{L}).$$

63, S. 184: Aus Gl. (3.3–34) und der HERMITEizität von $\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}$ folgt

$$\boxed{\mathcal{P}_{|\Phi\rangle} \xrightarrow{\Lambda'} \mathcal{P}_{|\Phi'\rangle} = \frac{|\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}\Phi\rangle\langle\Phi\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}|}{||\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}\Phi||^2} = \frac{\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}\mathcal{P}_{|\Phi\rangle}\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}(\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}\mathcal{P}_{|\Phi\rangle})}}. \tag{a}$$

Die Gleichheit der Nenner ergibt sich aus

$$||\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}\Phi||^2 = \underset{\mu\bar{\mu}}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} \langle\Phi \mid u^{\mu}_{\Lambda'}\rangle \langle u^{\mu}_{\Lambda'} \mid u^{\bar{\mu}}_{\Lambda'}\rangle \langle u^{\bar{\mu}}_{\Lambda'} \mid \Phi\rangle \, \mathrm{d}\mu \, \mathrm{d}\bar{\mu}$$

$$= \underset{\mu\bar{\mu}}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} \langle u^{\mu}_{\Lambda'} \mid u^{\bar{\mu}}_{\Lambda'}\rangle \langle u^{\bar{\mu}}_{\Lambda'} \mid \Phi\rangle \langle\Phi \mid u^{\mu}_{\Lambda'}\rangle \, \mathrm{d}\mu \, \mathrm{d}\bar{\mu} = \mathrm{Sp}(\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}} \mathcal{P}_{|\Phi\rangle}),$$

weil alle Vektoren senkrecht auf $\mathrm{u}_{\Lambda'}$ keinen Beitrag liefern. Wegen $\mathcal{P}^2_{\mathrm{u}_{\Lambda'}} = \mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}$ und Aufg. 37 kann man in Gl. (a) die Spur auch symmetrisch schreiben,

$$\mathcal{P}_{|\Phi'\rangle} = \frac{\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}} \mathcal{P}_{|\Phi\rangle} \mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}}}{\mathrm{Sp}\,(\mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}} \mathcal{P}_{|\Phi\rangle} \mathcal{P}_{\mathrm{u}_{\Lambda'}})}. \tag{a'}$$

Ist Λ' nicht entartet, so folgt aus Gl. (3.3–31) einfach

$$\mathcal{P}_{|\Phi'\rangle} = \mathcal{P}_{|\mathrm{u}_{\Lambda'}\rangle}, \tag{b}$$

was sich natürlich auch aus Gl. (a′) ergibt.

64, S. 187: Für $|\Phi\rangle = \underset{k}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} |v_k\rangle \, \Phi(k) \, \mathrm{d}k$ liefert Gl. (3.3–35)

$$w_{\Lambda} = \underset{kk'}{\sum\!\!\!\!\!\!\int} \Phi^*(k)\Phi(k') \, v^*(\Lambda, k) \, v(\Lambda, k') \, \mathrm{d}k \, \mathrm{d}k'$$

mit $v(\Lambda, k) = \langle u_{\Lambda} \mid v_k\rangle$. Die sich ergebende *Interferenz der quantentheoretischen Wahrscheinlichkeitsamplituden* $\Phi(k)$ spiegelt die Welleneigenschaft der Materie wider.

65, S. 187: a) Aus Gl. (3.3–32) folgt für den Zustandsvektor nach einer infinitesimalen Ortsmessung

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x}^{x+\Delta x} |u_x\rangle \, \mathrm{d}x = |u_x\rangle \sqrt{\Delta x}\,.$$

Nach Gl. (3.3–35) ist dann die Wahrscheinlichkeit für einen diskreten Energiewert E

$$w_E = |\langle u_E \,|\Phi\rangle|^2 = |u_E(x)|^2 \, \Delta x.$$

b) Nach der Messung von E ist

$$|\Phi\rangle = |u_E\rangle.$$

Die Wahrscheinlichkeit für das infinitesimale Ortsintervall $x \cdots x + \Delta x$ ist nach Gl. (3.3–37)

$$w_{x\ldots x+\Delta x} = |\langle u_x \,|\Phi\rangle|^2 \, \Delta x = |u_E(x)|^2 \, \Delta x,$$

also dasselbe Ergebnis wie im Fall a).

66, S. 187: Wegen $w_A + w_{\text{nicht}\,A} = 1$ ist

$$w_{\text{nicht}\,A} = 1 - \langle \mathcal{P}_{\mathfrak{u}_A} \rangle .$$

Dies ist der Erwartungswert des Operators $\mathbf{1} - \mathcal{P}_{\mathfrak{u}_A}$, der auf jenen Teil von $\mathfrak{U}$ projiziert, der senkrecht auf dem Eigenraum $\mathfrak{u}_A$ ist.

67, S. 192: Das Gleichheitszeichen in der Unschärferelation erfordert einerseits nach Gl. (3.3–51)

$$|g\Phi\rangle = \alpha\, |f\Phi\rangle$$

und andererseits nach Gl. (3.3–53)

$$\langle \Phi |\, (f g + g f) \Phi \rangle = 0$$

oder $\alpha + \alpha^* = 0$, d. h. $\alpha = \mathrm{i}a$ (a reell). Es muß also $|\Phi\rangle$ die Bedingung

$$(\mathcal{G} - \langle \mathcal{G} \rangle)\, |\Phi\rangle = \mathrm{i}a(\mathcal{F} - \langle \mathcal{F} \rangle)\, |\Phi\rangle$$

erfüllen.

68, S. 192: $\Delta E \cdot \Delta x \geqq \dfrac{\hbar}{2} |\langle v \rangle|, \quad \Delta E \cdot \Delta p \geqq \dfrac{\hbar}{2} |\langle \mathcal{K} \rangle|.$

69, S. 207: *Zu den Gln.* (3.5–29 *u.* 30): Aus Gl. (3.5–28) und der dazu adjungierten Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{C}^\dagger}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, \mathscr{C}^\dagger (\mathscr{H} - \mathscr{X}) \quad (\mathscr{H} \text{ und } \mathscr{X} \text{ sind HERMITEsch}),$$

folgt für

$$\frac{\mathrm{d}\mathscr{C}^\dagger \mathscr{C}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\mathscr{C}^\dagger}{\mathrm{d}t} \mathscr{C} + \mathscr{C}^\dagger \frac{\mathrm{d}\mathscr{C}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{0},$$

d. h., $\mathscr{C}^\dagger(t, t_0)\, \mathscr{C}(t, t_0) = \text{const} = \mathscr{C}^\dagger(t_0, t_0)\, \mathscr{C}(t_0, t_0)$. Weil aber nach Gl. (3.5–27) $\mathscr{C}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ gilt, ist $\mathscr{C}(t, t_0)$ unitär,

$$\mathscr{C}^\dagger(t, t_0) = \mathscr{C}^{-1}(t, t_0).$$

Die Gln. (3.5–30$_2$ und 30$_3$) folgen unmittelbar durch Nacheinanderanwenden oder Rückgängigmachen der Evolution (3.5–27). —

Zu Gl. (3.5–35): Aus Gl. (3.5–10), der dazu adjungierten Gleichung

$$\mathscr{A}^\dagger(t, t_0) = \mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_1)$$

und Gl. (3.5–30$_2$) folgt

$$\begin{aligned} \mathscr{U}(t, t_0) &= \mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, \mathscr{A}^\dagger(t, t_1)\, \mathscr{C}(t, t_1)\, \mathscr{C}(t_1, t_0) \\ &= \mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, \mathscr{U}(t, t_1)\, \mathscr{C}(t_1, t_0) \\ &= \mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, \mathscr{U}(t, t_1)\, \mathscr{A}(t_1, t_0)\, \mathscr{U}(t_1, t_0). \end{aligned}$$

Zu Gl. (3.5–36): Aus Gl. (3.5–30$_3$ u. 33) folgt

$$\mathscr{A}(t, t_0)\, \mathscr{U}(t, t_0) = \mathscr{U}^\dagger(t_0, t)\, \mathscr{A}^\dagger(t_0, t)$$

oder

$$\mathscr{U}(t, t_0) = \mathscr{A}^\dagger(t, t_0)\, \mathscr{U}^\dagger(t_0, t)\, \mathscr{A}(t, t_0).$$

70, S. 207: Wegen Gl. (3.5–8) gilt

$$\mathscr{A}^\dagger(t_1, t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t_1)\cdot(t-t_1)}\, \mathscr{A}(t_1, t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t_0)\cdot(t_1-t_0)}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t_0)\cdot(t-t_1)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t_0)\cdot(t_1-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(t_0)\cdot(t-t_0)}.$$

71, S. 212: Nach 3.2 § 6b ist $\overset{\circ}{p} = \mathscr{K}$ und $\overset{\circ}{x} = \frac{1}{m}\, p$. Also gilt nach dem EHRENFEST-schen Theorem

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \langle \mathscr{K}\rangle \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle.$$

a) *Homogenes, elektrisches Feld:* $\mathscr{K} = q\,|\mathfrak{E}|\,1$.

$$\langle p\rangle(t) = \langle p\rangle(t_0) + q\,|\mathfrak{E}|\cdot(t-t_0),$$

$$\langle x\rangle(t) = \langle x\rangle(t_0) + \frac{1}{m}\langle p\rangle(t_0)\cdot(t-t_0) + \frac{q}{m}\,|\mathfrak{E}|\,\frac{(t-t_0)^2}{2}.$$

b) *Harmonischer Oszillator:* $\mathscr{K} = -\,m\,\omega^2\,x$.

Das Gleichungssystem

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle + m\,\omega^2\langle x\rangle = 0,$$

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle - \frac{1}{m}\langle p\rangle = 0$$

hat die Lösungen

$$\langle x\rangle(t) = \langle x\rangle(t_0)\cdot\cos\omega(t-t_0) + \frac{1}{m\,\omega}\langle p\rangle(t_0)\cdot\sin\omega(t-t_0),$$

$$\langle p\rangle(t) = \langle p\rangle(t_0)\cdot\cos\omega(t-t_0) - m\,\omega\,\langle x\rangle(t_0)\cdot\sin\omega(t-t_0).$$

Liegt insbesondere ein stationärer Oszillatorzustand vor, so ist $\langle x\rangle(t) = \langle x\rangle(t_0) = 0$ und $\langle p\rangle(t) = \langle p\rangle(t_0) = 0$.

Weil in den beiden hier betrachteten Beispielen $\langle \mathscr{K}(x)\rangle = K(\langle x\rangle)$ ist, stimmt die Dynamik der Erwartungswerte mit der klassischen Dynamik überein. Im allgemeinen gilt dies jedoch nicht.

72, S. 212: Für stationäre Zustände ist der Erwartungswert

$$\left\langle \overbrace{\vec{x}\,\vec{p} + \vec{p}\,\vec{x}}^{\circ} \right\rangle = 0,$$

so daß aus Aufg. 61 folgt

$$2\,\langle \mathscr{T}\rangle = \langle \vec{x}\ \mathrm{grad}\ \mathscr{V}\rangle.$$

Ist $\mathscr{V}(\vec{x})$ homogen vom Grad α, so wird

$$2\,\langle \mathscr{T}\rangle = \alpha\,\langle \mathscr{V}\rangle. \tag{a}$$

Außerdem ist im stationären Zustand $\langle \mathscr{H}\rangle = E$, so daß gilt

$$\langle \mathscr{T}\rangle + \langle \mathscr{V}\rangle = E. \tag{b}$$

Aus Gl. (a) und (b) folgt

$$\langle \mathscr{T}\rangle = \frac{\alpha}{\alpha+2}\,E \quad \text{und} \quad \langle \mathscr{V}\rangle = \frac{2}{\alpha+2}\,E. \tag{c}$$

Diese Relationen gelten nach dem auf S. 210 Gesagten nur für die *diskreten* Energiezustände.

Beispiele:

1. Oszillatorpotential, $\alpha = 2$: $\langle \mathcal{T} \rangle = \langle \mathcal{V} \rangle = E/2$.
2. COULOMB-Potential, $\alpha = -1$: $\langle \mathcal{T} \rangle = -E$, $\langle \mathcal{V} \rangle = 2E$,

z. B. ist also der Erwartungswert der kinetischen Energie eines Elektrons im Wasserstoffgrundzustand 13,53 eV (vgl. Fig. 7, S. 26).

73, S. 221: $\mathcal{H} = \dfrac{p^2}{2m} - K\,x$.

a) SCHRÖDINGER-*Bild:*

$$p^S(t) = p^S(t_0), \quad x^S(t) = x^S(t_0), \quad \mathcal{H}^S(t) = \mathcal{H}^S(t_0).$$

Für den Zustandsvektor $|\Phi^S(t)\rangle$ gilt

$$\frac{|\mathrm{d}\Phi^S\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\{\frac{p^{S^2}}{2m} - K\,x^S\right\}|\Phi^S(t)\rangle.$$

$|\Phi^S(t)\rangle$ entsteht aus $|\Phi^S(t_0)\rangle$ durch

$$\mathcal{C}^S(t, t_0) = \mathcal{U}^S(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{p^{S^2}}{2m} - K x^S\right)\cdot(t-t_0)}.$$

b) HEISENBERG-*Bild:*

$$\frac{\mathrm{d}p^H}{\mathrm{d}t} = K\,\mathbf{1}, \quad \frac{\mathrm{d}x^H}{\mathrm{d}t} = \frac{p^H}{m}, \quad \frac{\mathrm{d}\mathcal{H}^H}{\mathrm{d}t} = \mathbf{0}.$$

Nach Gl. (3.5–19) oder durch direkte Integration folgt

$$p^H(t) = p^H(t_0) + K\cdot(t - t_0)\,\mathbf{1},$$

$$x^H(t) = x^H(t_0) + \frac{1}{m}\,p^H(t_0)\cdot(t - t_0) + \frac{K}{m}\,\frac{(t - t_0)^2}{2}\,\mathbf{1},$$

$$\mathcal{H}^H(t) = \mathcal{H}^H(t_0).$$

c) *Wechselwirkungsbild:* $\mathcal{H}_0 = \dfrac{p^2}{2m}$, $\mathcal{H}_1 = +K\,x$.

Aus

$$\frac{\mathrm{d}p^W}{\mathrm{d}t} = \mathbf{0}, \quad \frac{\mathrm{d}x^W}{\mathrm{d}t} = \frac{p^W}{m}, \quad \frac{\mathrm{d}\mathcal{H}^W}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\mathcal{H}_1^W}{\mathrm{d}t} = -K\,\frac{\mathrm{d}x^W}{\mathrm{d}t}$$

folgt

$$p^W(t) = p^W(t_0), \quad x^W(t) = x^W(t_0) + \frac{p^W(t_0)}{m}(t - t_0),$$

$$\mathcal{H}_1^W(t) = -K\,x^W(t) = -K\left\{x^W(t_0) + \frac{p^W(t_0)}{m}(t - t_0)\right\}.$$

Für den Zustandsvektor $|\Phi^W(t)\rangle$ gilt

$$\frac{\mathrm{d}|\Phi^W(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}K\,x^W(t)\,|\Phi^W(t)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}K\left\{x^W(t_0) + \frac{p^W(t_0)}{m}(t - t_0)\right\}|\Phi^W(t)\rangle.$$

$|\Phi^W(t)\rangle$ entsteht aus $|\Phi^W(t_0)\rangle$ durch den unitären Operator $\mathcal{C}^W(t, t_0)$, der nach Gl. (3.5–111) lautet

$$\mathcal{C}^W(t, t_0) = \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^W(t_0)^2}{2m}(t-t_0)}\;\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\{\frac{p^W(t_0)^2}{2m} - K x^W(t_0)\right\}(t-t_0)}.$$

Wegen $[p^2, x] \neq 0$ kann man dafür aber *nicht* einfach $e^{\frac{i}{\hbar} K x^W(t_0)\cdot(t-t_0)}$ schreiben.

74, S. 222: Aus $\dot{x}^H = \frac{1}{m} p^H$ und $\dot{p}^H = -m\omega^2 x^H$ folgt

$$\ddot{x}^H = -\omega^2 x^H \quad \text{und} \quad \ddot{p}^H = -\omega^2 p^H.$$

Die Lösungen dieser Operatorgleichungen haben dieselbe Form wie im klassischen Fall,

$$\left.\begin{aligned} x^H(t) &= x^H(t_0)\cos\omega(t-t_0) + \frac{p^H(t_0)}{m\omega}\sin\omega(t-t_0),\\ p^H(t) &= p^H(t_0)\cos\omega(t-t_0) - x^H(t_0)\, m\omega\sin\omega(t-t_0). \end{aligned}\right\} \quad \text{(a)}$$

Es ist nützlich sich zu überlegen, daß dieses Ergebnis auch aus der allgemeinen Beziehung

$$x^H(t) = \mathcal{A}^H(t, t_0)\, x^H(t_0)\, \mathcal{A}^{H\dagger}(t, t_0),$$

$$p^H(t) = \mathcal{A}^H(t, t_0)\, p^H(t_0)\, \mathcal{A}^{H\dagger}(t, t_0)$$

folgt. Dazu setzen wir in Gl. (3.5–19) $\mathcal{X} = \mathcal{H}^H = \frac{p^H(t_0)^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^H(t_0)^2$ ein und erhalten nach Gl. (3.2–17 und 18) für die Klammern

$$[\mathcal{H}^H, x^H(t_0)]_{(2n)} = (-1)^n \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{2n} \omega^{2n} x^H(t_0),$$

$$[\mathcal{H}^H, x^H(t_0)]_{(2n+1)} = (-1)^n \left(\frac{\hbar}{i}\right)^{2n+1} \frac{\omega^{2n+1}}{m\omega} p^H(t_0).$$

Wir haben die Reihenentwicklung des cos und sin vor uns und gelangen wieder zum Ergebnis (a).

75, S. 222: *Freies Teilchen:* Aus Gl. (3.5–95) folgt

$$[x^H(t), x^H(t_0)] = [p^H(t_0), x^H(t_0)]\frac{t-t_0}{m} = \frac{\hbar}{i}\frac{t-t_0}{m}\,1.$$

Oszillator: Aus Aufg. 74 folgt

$$[x^H(t), x^H(t_0)] = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\sin\omega(t-t_0)}{m\omega}\,1.$$

76, S. 237: a) *Der Inversionsoperator* $\mathcal{D}(i)$: Aus Gln. (2.2–15) und (3.2–17 u. 18) folgt

$$\mathcal{D}(i)\, x_k\, \mathcal{D}^{-1}(i) = x_k\left(1 - \frac{\pi^2}{2!} + \frac{\pi^4}{4!} - \cdots\right) + \frac{p_k}{\alpha}\left(\pi - \frac{\pi^3}{3!} + \frac{\pi^5}{5!} - \cdots\right)$$

$$= x_k \cos\pi + \frac{p_k}{\alpha}\sin\pi = -x_k$$

und analog

$$\mathcal{D}(i)\, p_k\, \mathcal{D}^{-1}(i) = -p_k.$$

Setzt man $b_k = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\alpha}\, x_k + \frac{i}{\sqrt{\alpha}}\, p_k\right)$, so nimmt der Inversionsoperator die einfache Gestalt

$$\mathcal{D}(i) = e^{i\pi\sum b_k^\dagger b_k}$$

an. Weil $[b_k, b_k^\dagger] = 1$ ist, hat $b_k^\dagger b_k$ nur ganzzahlige Eigenwerte (4.2 § 2). Deshalb

ist $\mathscr{D}^2(i) = 1$. Der Wert der reellen Größe α — von der Dimension (Impuls/Länge) — ist für $\mathscr{D}(i)$ belanglos.

b) *Der Dehnungsoperator* $\mathscr{D}(a)$*:* Aus Gln. (2.2–15) und (3.2–17 u. 18) folgt

$$\mathscr{D}(a)\, x_k\, \mathscr{D}^{-1}(a) = \left(1 - \frac{a}{1!} + \frac{a^2}{2!} - \frac{a^3}{3!} + \cdots\right) x_k = \mathrm{e}^{-a}\, x_k$$

und analog

$$\mathscr{D}(a)\, p_k\, \mathscr{D}^{-1}(a) = \mathrm{e}^{a}\, p_k .$$

77, S. 239: a) Aus Gl. (2.2–15) und (3.2–17 u. 18) resultiert

$$x' = \mathscr{D}(v)\, x\, \mathscr{D}^{-1}(v) = x + vt\, 1, \quad p' = \mathscr{D}(v)\, p\, \mathscr{D}^{-1}(v) = p + mv\, 1, \tag{a}$$

d. h., $\mathscr{D}(v)$ stellt eine GALILEI-Transformation der Geschwindigkeit v dar.

Der HAMILTON-Operator eines kräftefreien Teilchens ist nicht GALILEI-invariant, wohl aber die Bewegungsgleichung, z. B. jene des Zustandsvektors im SCHRÖDINGER-Bild. Aus Gl. (a) folgt nämlich einerseits

$$[\mathscr{H}, \mathscr{D}] = \frac{1}{2m}([p, \mathscr{D}]\, p + p\, [p, \mathscr{D}]) = -\frac{v}{2}(\mathscr{D}\, p + p\, \mathscr{D})$$

$$= -\mathscr{D} \cdot \left(v\, p - \frac{m v^2}{2}\, 1\right).$$

Andererseits kann man nach Gl. (2.2–16) für $\mathscr{D}(v)$ auch schreiben

$$\mathscr{D}(v) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} mvx}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} tv p}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{mv^2}{2} t 1}, \tag{b}$$

so daß man erhält

$$\left(\frac{\partial \mathscr{D}}{\partial t}\right)_{\mathrm{ex}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\, \mathscr{D} \cdot \left(v\, p - \frac{mv^2}{2}\, 1\right).$$

Die Bedingung (3.6–16) für die Forminvarianz der Bewegungsgleichung ist also erfüllt.

Aus $\overset{\circ}{\mathscr{D}} = 0$ folgt, daß der HERMITEsche Operator

$$g(x, p, t) = m\, x - t\, p \tag{c}$$

eine *Erhaltungsgröße* ist, $\overset{\circ}{g} = 0$. Nach dem EHRENFESTschen Theorem (3.5–54) gilt daher für die Erwartungswerte

$$m \langle x \rangle (t) - t \langle p \rangle (t) = \text{const} = m \langle x \rangle (0).$$

[Vgl. dazu die analogen klassischen Gleichung (1.2–45c) und Gl. (e) in Aufg. 23.]

b) Für ein N-Teilchen-Problem lautet der GALILEI-Operator der Geschwindigkeit $\mathfrak{v}$

$$\mathscr{D}(\mathfrak{v}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathfrak{v} \sum\limits_{\nu=1}^{N} (m_\nu \vec{x}_\nu - t \vec{p}_\nu)}.$$

Er ergibt

$$\left.\begin{aligned} \vec{x}'_\nu &= \mathscr{D}(\mathfrak{v})\ \vec{x}_\nu\, \mathscr{D}^{-1}(\mathfrak{v}) = \vec{x}_\nu + \mathfrak{v}\, t\, 1 \\ \vec{p}'_\nu &= \mathscr{D}(\mathfrak{v})\ \vec{p}_\nu\, \mathscr{D}^{-1}(\mathfrak{v}) = \vec{p}_\nu + m_\nu\, \mathfrak{v}\, 1. \end{aligned}\right\} \tag{d}$$

Wirkt zwischen den Teilchen nur ein Potential $\mathscr{V} = \mathscr{V}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_\nu - \vec{x}_\mu, \ldots)$, so folgt aus Gl. (2.2–34) und Gl. (d_1), daß $\mathscr{V}$ gegen die GALILEI-Transformation invariant ist,

$$\mathscr{D}(\mathfrak{v})\, \mathscr{V}\, \mathscr{D}^{-1}(\mathfrak{v}) = \mathscr{V}.$$

Nach denselben Überlegungen wie in Teil a) ist der HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \sum_{\nu=1}^{N} \frac{\vec{p}_\nu^{\,2}}{2m_\nu} + \mathscr{V}$$

nicht invariant gegen GALILEI-Transformation, aber die Bedingung der Forminvarianz der Bewegungsgleichung, $\overset{\circ}{\mathscr{D}} = \mathcal{O}$, ist erfüllt. Hieraus folgt wieder, daß der HERMITEsche Operator

$$\vec{\mathscr{g}} = \sum_{\nu=1}^{N} (m_\nu \vec{x}_\nu - t\, \vec{p}_\nu) \tag{e}$$

eine Erhaltungsgröße ist, $\overset{\circ}{\vec{\mathscr{g}}} = \mathcal{O}$ (*Schwerpunktsatz*). Für die Erwartungswerte liefert daher das EHRENFESTsche Theorem

$$\sum_{\nu=1}^{N} (m_\nu \langle \vec{x}_\nu \rangle (t) - t \langle \vec{p}_\nu \rangle (t)) = \text{const} = \sum_{\nu=1}^{N} m_\nu \langle \vec{x}_\nu \rangle (0). \tag{f}$$

***78,** S. 242: Die Überlegungen von 3.6 § 5 lassen sich sofort auf die dreidimensionale Translationsgruppe $T(3)$ erweitern. Aus der Kommutativität der Translationen folgt, daß die *Translationsoperatoren*

$$\mathscr{T}(\vec{\xi}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{i=1}^{3} \xi_i p_i} \qquad (\xi_i = \text{beliebige Translation}) \tag{a}$$

miteinander vertauschen. Insbesondere erhält man damit für zwei infinitesimale Translationen $\delta\vec{\xi}$ und $\delta\vec{\xi}'$

$$[\mathscr{T}(\delta\vec{\xi}), \mathscr{T}(\delta\vec{\xi}')] = \left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2 \sum_{i,k} [p_i, p_k]\, \delta\xi_i\, \delta\xi_k' = \mathcal{O}.$$

Weil die Translationen $\delta\xi_i$, $\delta\xi_k'$ beliebig sind, muß

$$[p_i, p_k] = \mathcal{O} \tag{b}$$

gelten.

Um zu einer Definition der *Ortsoperatoren* zu gelangen, erinnern wir uns, daß in der klassischen Physik der Schwerpunkt — d. h. bei *einem* Teilchen der Ort — mit der GALILEI-Transformation verknüpft ist (1.2–45c u. Aufg. 23). Wir wollen deshalb die unitären Operatoren $\mathscr{D}(\mathfrak{v})$ der GALILEI-Transformation aufsuchen.[1]) Aus der Eigenschaft der GALILEI-Transformationen, eine kontinuierliche ABELsche Gruppe zu bilden, finden wir durch eine Überlegung analog zu jener von 3.6 § 5 für die

[1]) Von den Ergebnissen der Aufg. 77, bei der wir die Vertauschungsrelation zwischen Ort und Impuls vorausgesetzt haben, wollen wir jetzt natürlich keinen Gebrauch machen.

GALILEI-Operatoren

$$\mathscr{D}(\mathfrak{v}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{3} v_i g_i} \qquad (g_i = \text{HERMITEsche Operatoren}). \tag{c}$$

Aus der Vertauschbarkeit aller Operatoren $\mathscr{D}(\mathfrak{v})$ untereinander folgt wieder

$$[g_i, g_k] = \mathcal{O}. \tag{d}$$

Da für einen kräftefreien Massenpunkt die Bewegungsgleichungen GALILEI-invariant sein müssen, gilt in diesem Fall $\mathring{\mathscr{D}}(\mathfrak{v}) = \mathcal{O}$ und damit $\mathring{g}_i = \mathcal{O}$, d. h., die Operatoren $g_i(\vec{x}, \vec{p}, t)$ sind Erhaltungsgrößen. Weil wir in der klassischen Behandlung aus der GALILEI-Invarianz auf Erhaltungsgrößen geführt wurden, die für $t = 0$ gerade $m x_i$ waren, müssen wir in der quantentheoretischen Behandlung die ebenfalls aus der GALILEI-Invarianz folgenden Größen $\frac{1}{m}\, g_i(\vec{x}, \vec{p}, 0)$ *a priori* mit den Ortsoperatoren x_i identifizieren. Die Gleichungen (d) führen daher auf die Vertauschbarkeit der Ortsoperatoren

$$[x_i, x_k] = \mathcal{O}. \tag{e}$$

Aus der Eigenschaft der Translationsoperatoren

$$\mathscr{T}(\vec{\xi})\, x_k\, \mathscr{T}^{-1}(\vec{\xi}) = x_k - \xi_k \mathbb{1}$$

folgt bei Anwendung auf eine infinitesimale Translation (analog zu den Überlegungen in 3.6 § 5)

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{i}{\hbar}\, [p_i, x_k]\, \delta\xi_i = \sum_i \delta_{ik} \cdot \delta\xi_i \mathbb{1}$$

oder

$$\frac{i}{\hbar}\, [p_i, x_k] = \delta_{ik} \mathbb{1}. \tag{f}$$

Aus der Definition der GALILEI-Transformation

$$\mathscr{D}(\mathfrak{v})\, x_k\, \mathscr{D}^{-1}(\mathfrak{v}) = x_k + v_k\, t\, \mathbb{1},$$

$$\mathscr{D}(\mathfrak{v})\, p_k\, \mathscr{D}^{-1}(\mathfrak{v}) = p_k + m\, v_k \mathbb{1}$$

ergibt sich infinitesimal

$$[g_i, x_k] = -\frac{\hbar}{i}\, t\, \delta_{ik} \mathbb{1} \quad \text{und} \quad [g_i, p_k] = -\frac{\hbar}{i}\, m\, \delta_{ik} \mathbb{1},$$

woraus wieder [Gl. (3.2–17 u. 18)]

$$g_i = m\, x_i - p_i\, t \tag{g}$$

folgt, also gerade der Ausgangspunkt der Aufg. 77.

79, S. 245: e_i seien die Komponenten von e und e'_i jene von e'. Gl. (3.6–39) liefert

$$[e_1 \mathscr{J}_1 + e_2 \mathscr{J}_2 + e_3 \mathscr{J}_3,\ e'_1 v_1 + e'_2 v_2 + e'_3 v_3]$$
$$= e_1 e'_2 [\mathscr{J}_1, v_2] + e_2 e'_1 [\mathscr{J}_2, v_1] + \cdots$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\, (e_1 e'_2 - e_2 e'_1)\, v_3 + \cdots.$$

Also gilt

$$[(\mathrm{e}\vec{\mathscr{J}}),(\mathrm{e}'\vec{v})] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\mathrm{e}\times\mathrm{e}')\vec{v}\,.$$

***80,** S. 249: Der HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \mathscr{V}(r) \tag{a}$$

ist invariant gegenüber allen Drehinversionen $O'(3)$ (5.4 § 1) um den Nullpunkt.

a) Legt man ein homogenes elektrisches Feld $\mathfrak{E}_0$ an, so lautet der HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H}_{\mathrm{el}} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \mathscr{V}(r) - q\vec{x}\,\mathfrak{E}_0. \tag{b}$$

Von den Drehungen $O(3)$ verbleiben nur noch jene um die $\mathfrak{E}_0$-Richtung als Symmetrieelemente. Außerdem ist $\mathscr{H}_{\mathrm{el}}$ noch invariant gegen alle Spiegelungen an Ebenen, die $\mathfrak{E}_0$ und den Nullpunkt enthalten. (Die Inversion $\vec{x} \to -\vec{x}$ ist hingegen kein Symmetrieelement von $\mathscr{H}_{\mathrm{el}}$ mehr!) Insgesamt gelangt man damit zu der Gruppe $C_{\infty v}$ aller Drehspiegelungen um $\mathfrak{E}_0$ (v = *vertikale* Spiegelebenen bei senkrechter Drehachse $\mathfrak{E}_0$). Diese Gruppe ist nicht ABELsch. Man kann zeigen, daß $C_{\infty v}$ nur ein- und zweidimensionale irreduzible Darstellungen hat. Die Eigenwerte von (b) sind daher ein- oder zweifach (abgesehen von „zufälliger" Entartung). Die Ausreduktion zeigt, daß die $(2l+1)$-fachen Eigenwerte von (a) [$l \geqq 0$, ganz (vgl. 4.3 § 2 u. 3)] in l *zweifache Terme* ($\pm\, m$) und 1 *einfachen Term* ($m = 0$) aufspaltet (STARK-Effekt).

b) Im homogenen Magnetfeld $\mathfrak{B}_0$ lautet nach Gl. (1.2–86) der HAMILTON-Operator (ohne Spinberücksichtigung)

$$\mathscr{H}_m = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \mathscr{V}(r) - \frac{q}{2mc}\vec{\ell}\,\mathfrak{B}_0 + \frac{q^2}{8mc^2}(\vec{x}\times\mathfrak{B}_0)^2. \tag{c}$$

Neben den Drehungen um die $\mathfrak{B}_0$-Richtung ist jetzt auch die Inversion $\vec{x} \to -\vec{x}$ Symmetrieelement, weil nach Gl. (3.6–15) der Drehimpuls als antimetrischer Tensor dabei sein Vorzeichen nicht verändert. Die Spiegelung an der Ebene, die den Nullpunkt enthält und senkrecht zu $\mathfrak{B}_0$ liegt, ist ebenfalls Symmetrieelement, weil sie aus einer Drehung um 180° um $\mathfrak{B}_0$ und anschließender Inversion entsteht. Die Symmetriegruppe von $\mathscr{H}_m$ ist $C_{\infty h}$ (h = *horizontale* Spiegelebene bei vertikaler Drehachse $\mathfrak{B}_0$). Diese Gruppe ist ABELsch. Nach 5.4 § 4 b existieren daher nur eindimensionale irreduzible Darstellungen, die Eigenwerte von (c) sind einfach. Ein $(2l+1)$-facher Energieterm von (a) spaltet daher im Magnetfeld in $2l+1$ *einfache Terme* auf (ZEEMAN-Effekt).

***81,** S. 259: Wir differenzieren den Erwartungswert

$$\langle\mathscr{H}\rangle = \frac{\mathrm{Sp}\,\mathscr{H}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{\mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}} \qquad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right)$$

nach β und erhalten

$$\frac{\partial\langle\mathscr{H}\rangle}{\partial\beta} = -kT^2C = -\langle\mathscr{H}^2\rangle + \langle\mathscr{H}\rangle^2.$$

Dabei ist $C = \frac{\partial\langle\mathscr{H}\rangle}{\partial T}$ die Wärmekapazität des Systems bei konstant gehaltenen äußeren Parametern $V, \mathfrak{H}, \ldots$ Wegen Gl. (3.3–26) erhalten wir für die Energieunschärfe

$$(\Delta E)^2 = k\,T^2\,C \tag{a}$$

oder

$$\left(\frac{\Delta E}{\langle\mathscr{H}\rangle}\right)^2 = k T^2 \frac{C}{\langle\mathscr{H}\rangle^2}.$$

Weil $\langle\mathscr{H}\rangle$ und damit auch C proportional zur Teilchenzahl N ist, gilt

$$\boxed{\left|\frac{\Delta E}{\langle\mathscr{H}\rangle}\right| \sim \frac{1}{\sqrt{N}}}, \tag{b}$$

d. h., *die relative Energieunschärfe wird mit zunehmender Teilchenzahl immer kleiner.* Der Erwartungswert $\langle\mathscr{H}\rangle$ stimmt daher mit der thermodynamischen inneren Energie U überein,

$$U(T, V, \mathfrak{H}, \ldots) = \langle\mathscr{H}\rangle\,(T, V, \mathfrak{H}, \ldots).$$

Deshalb ist man auch berechtigt, die aus der Zustandssumme $Z = \mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}$ berechneten Erwartungswerte, wie Druck oder Magnetisierung, als die tatsächlich vom physikalischen System realisierten, thermodynamischen Zustandsgrößen zu betrachten. *Bei makroskopischen Größen kann man die Erwartungswerte mit den beobachteten Meßwerten identifizieren.* Mikroskopische Größen hingegen, wie etwa der Ort *eines* Elektrons streuen stark, der Erwartungswert

$$\langle\vec{x}_\nu\rangle = \frac{\mathrm{Sp}\,\vec{x}_\nu\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{\mathrm{Sp}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}$$

wird im allgemeinen *nicht* mit dem Wert übereinstimmen, den man bei einer Messung von $\vec{x}_\nu$ findet.

82, S. 263: Die Anordnung mißt den zweifachen Eigenwert 1 des Projektors

$$\mathscr{P}_{\mathrm{u}} = |u_+\rangle\,\langle u_+| + |u_0\rangle\,\langle u_0|.$$

Hat man über den Drehimpulszustand vor dieser Messung keine Information, so ist $\rho = \frac{1}{3}\,\mathbb{1}$. Nach Durchlaufen der Anordnung lautet der statistische Operator [Gl. (3.7–40)]

$$\rho' = \frac{1}{2}\,(|u_+\rangle\,\langle u_+| + |u_0\rangle\,\langle u_0|).$$

83, S. 267: Zur Zeit $t = 0$ liegt nach Gl. (3.7–40) der statistische Operator

$$\rho(0) = \frac{1}{n_a}\sum_{\mu_a=1}^{n_a} |u_{E_a}^{\mu_a}\rangle\,\langle u_{E_a}^{\mu_a}|$$

vor. Ist der Gesamt-Hamilton-Operator $\mathscr{H}$ explizit zeitunabhängig, so lautet die Integration der von Neumann-Gleichung (Schrödinger-Bild)

$$\rho(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}t}\,\rho(0)\,\mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathscr{H}t}.$$

Die Wahrscheinlichkeit für einen Energiewert E_b ist nach Gl. (3.7–23)

$$w_{E_a \to E_b}(t) = \sum_{\mu_b=1}^{n_b} \langle u_{E_b}^{\mu_b} \mid \rho(t)\, u_{E_b}^{\mu_b} \rangle ,$$

so daß man nach Einsetzen erhält

$$\boxed{w_{E_a \to E_b}(t) = \frac{1}{n_a} \sum_{\mu_a=1}^{n_a} \sum_{\mu_b=1}^{n_b} |\langle u_{E_b}^{\mu_b} \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}t}\, u_{E_a}^{\mu_a} \rangle|^2} \, .$$

Die einzelnen Glieder dieser Summe lassen sich z. B. wieder näherungsweise mittels DIRACscher Störungstheorie (3.5 § 8) berechnen.

84, S. 272: Aus Gl. (4.1–8) folgt

$$\langle u_x \,|\mathscr{T}_\xi \varphi \rangle = \langle \mathscr{T}_\xi^{-1} u_x \mid \varphi \rangle = \langle u_{x-\xi} \mid \varphi \rangle$$

oder

$$\mathscr{T}_\xi\, \varphi(x) = \varphi(x - \xi),$$

d. h., die Funktion $\mathscr{T}_\xi \varphi$ hat an der Stelle x denselben Wert wie die Funktion φ an der Stelle $x - \xi$.

85, S. 272: Setzt man in der Transformation (3.6–7) des Zustandsvektors den GALILEI-Operator $\mathscr{D}(v)$ nach Aufg. 77. Gl. (b) ein, so erhält man in der Ortsdarstellung bei Berücksichtigung von Gl. (4.1–8)

$$\langle u_x \mid \tilde{\Phi} \rangle = \langle \mathscr{D}(v)\, u_x \mid \Phi \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t} \langle e^{-\frac{i}{\hbar} mvx}\, e^{\frac{i}{\hbar} vt\not{p}}\, u_x \mid \Phi \rangle$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t}\, e^{\frac{i}{\hbar} mv(x-vt)} \langle u_{x-vt} \mid \Phi \rangle ,$$

d. h.,

$$\tilde{\Phi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\left(mvx - \frac{mv^2}{2}t\right)}\, \Phi(x - vt, t) . \qquad \text{(a)}$$

Für die *kräftefreie* Bewegung ist $\overset{\circ}{\mathscr{D}}(v) = \mathscr{O}$ (vgl. Aufg. 77). Daher ist nach 3.6 § 4 in diesem Fall ($V = 0$) die SCHRÖDINGER-Gleichung (4.1–21) für die Wahrscheinlichkeitsamplitude *forminvariant* gegenüber der GALILEI-Transformation (a).[1]

86, S. 272:

$$\langle u_x \mid x\, u_{x'} \rangle = x'\, \delta(x - x') ,$$

$$\langle u_x \mid \not{p}\, u_{x'} \rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'} \langle u_x \mid u_{x'} \rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx'} \delta(x - x') = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \delta(x - x') ,$$

$$\langle u_x \mid \mathscr{H}\, u_{x'} \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \delta(x - x') .$$

[1]) Dasselbe Ergebnis haben wir für das kräftefreie SCHRÖDINGERsche *Materiefeld* bereits in Aufg. 23 kennengelernt.

87, S. 272: Aus Aufg. 86 folgt

$$\int_{\bar{x}} (\langle u_x \mid p\, u_{\bar{x}}\rangle \langle u_{\bar{x}} \mid x\, u_{x'}\rangle - \langle u_x \mid x\, u_{\bar{x}}\rangle \langle u_{\bar{x}} \mid p\, u_{x'}\rangle)\, \mathrm{d}\bar{x}$$

$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \int_{\bar{x}} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}\, \delta(x-\bar{x}) \cdot x'\, \delta(\bar{x}-x') + \bar{x}\, \delta(x-\bar{x})\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{x}}\, \delta(\bar{x}-x')\right) \mathrm{d}\bar{x}$$

$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\, \delta(x-x') \cdot x' + x \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\, \delta(x-x')\right)$$

$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\, (x - x')\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\, \delta(x-x') = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\, \delta(x-x'),$$

wobei in der letzten Gleichung die Beziehung (5.1–34) angewendet wurde.

88, S. 272: Aus Aufg. 67 folgt in der Ortsdarstellung

$$(x - \langle x\rangle)\, \Phi(x) = \mathrm{i}a \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \langle p\rangle\right) \Phi(x).$$

Diese Differentialgleichung für $\Phi(x)$ hat die Lösung

$$\Phi(x) = C\, \mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar a}\left(\frac{x^2}{2} - \langle x\rangle x\right)}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle p\rangle x}. \tag{a}$$

Damit $\Phi(x)$ quadratintegrabel ist, muß $a < 0$ sein. Die Konstante C bestimmt sich aus der Normierung von $\Phi(x)$. Man verifiziert leicht, daß die mit (a) gebildeten Integrale $\int \Phi^*\, x\, \Phi\, \mathrm{d}x$ und $\int \Phi^*\, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\, \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x}\, \mathrm{d}x$ tatsächlich die in (a) stehenden Erwartungswerte $\langle x\rangle$ und $\langle p\rangle$ sind.

Der Energiegrundzustand des Oszillators [Gl. (4.2–36)] erfüllt die Bedingung (a); die Erwartungswerte $\langle x\rangle$ und $\langle p\rangle$ sind dort Null.

89, S. 275: Aus Gl. (2.2–7$_7$) folgt wegen $[x, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}] = \mathcal{O}$

$$[x, j_x] = \frac{1}{2m}\, (\mathscr{P}_{|u_x\rangle} [x, p] + [x, p]\, \mathscr{P}_{|u_x\rangle})$$

$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}\, \mathscr{P}_{|u_x\rangle}.$$

Es ist also $[x, j_x]\, |u_{x'}\rangle = 0$ für $x' \neq x$.

90, S. 278: Aus der Eigenwertgleichung der kinetischen Energie einer eindimensionalen Bewegung

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) u_E(p) = 0 \tag{a}$$

folgt, daß für $u_E(p) \neq 0$ gilt $E = p^2/2m$, d. h., die Eigenwerte E der kinetischen Energie sind positiv kontinuierlich,

$$E \geqq 0. \tag{b}$$

Für alle Werte $p \neq \pm\, p_E = \pm \sqrt{2mE}$ muß $u_E(p)$ verschwinden, an den Stellen $p = \pm\, p_E$ hingegen muß $u_E(p)$ so divergieren, daß auch dort die Eigenwertgleichung erfüllt ist. Diesen Forderungen genügt die Funktion

$$u_E(p) = C_{1E}\, \delta(p - p_E) + C_{2E}\, \delta(p + p_E). \tag{c}$$

Wegen $x\,\delta(x) = 0$ [Gl. (5.1–23)] ist nämlich

$$(p - p_E)(p + p_E)\{C_{1E}\,\delta(p - p_E) + C_{2E}\,\delta(p + p_E)\} = 0.$$

Die Eigenwerte E sind also zweifach, entsprechend den beiden Impulsrichtungen $\pm p_E$ (eindimensionale Betrachtung!).

Setzt man in der Normierungsbedingung

$$\langle u_E \mid u_{E'}\rangle = \delta(E - E') = 2m\,\delta(p_E^2 - p_{E'}^2) = \frac{m}{p_E}\{\delta(p_E - p_{E'}) + \delta(p_E + p_{E'})\}$$

die Eigenfunktionen (c) ein, so ergibt sich für die Konstanten

$$|C_{1E}|^2 + |C_{2E}|^2 = \frac{m}{\sqrt{2mE}}.$$

***91,** S. 278: Für die Matrixelemente des Potentials $\mathscr{V}(x) = -\hat{V}\,\delta(x)$ in der Impulsdarstellung ergibt sich

$$V(p, p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx = -\frac{\hat{V}}{2\pi\hbar}.$$

Damit lautet die Energieeigenwertgleichung eines Teilchens in diesem Potential nach Gl. (4.1–49)

$$\frac{p^2}{2m}u_E(p) - \frac{\hat{V}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} u_E(p')\,dp' = E\,u_E(p), \tag{a}$$

oder

$$u_E(p) = \frac{\hat{V}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} u_E(p')\,dp' \cdot \mathrm{P}\frac{1}{\dfrac{p^2}{2m} - E} + C_1\,\delta\left(p - \sqrt{2mE}\right) + C_2\,\delta\left(p + \sqrt{2mE}\right), \tag{b}$$

wobei von Gl. (5.1–52) Gebrauch gemacht wurde.

1. **$E < 0$:** In diesem Fall ist $p \neq \pm\sqrt{2mE}$, so daß die beiden letzten Terme entfallen und das Zeichen P unnötig wird. Integrieren wir über p, so ergibt sich

$$1 = \frac{\hat{V}}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{\dfrac{p^2}{2m} - E} = \frac{m\hat{V}}{\hbar\sqrt{-2mE}}$$

oder

$$E = -\frac{m\hat{V}^2}{2\hbar^2}. \tag{c}$$

Es existiert also nur *ein* gebundener Energiezustand, dessen Eigenfunktion in der Impulsdarstellung nach Gl. (b) lautet

$$u_E(p) = \frac{\hat{V}m}{\pi\hbar}\,\frac{C}{p^2 + \left(\dfrac{m\hat{V}}{\hbar}\right)^2}. \tag{d}$$

Die Normierung liefert $|C|^2 = 2\pi m\hat{V}/\hbar$.

In Aufg. 18 sind wir durch eine Rechnung in der Ortsdarstellung zu demselben Eigenwert (c) gelangt. Man verifiziert leicht, daß die Fourier-Transformierte der dort angegebenen Eigenfunktion $u_E(x)$ mit dem Ausdruck (d) übereinstimmt.

2. $E > 0$: E ist kontinuierlich, die Eigenfunktionen sind nun durch den vollen Ausdruck (b) gegeben. Integriert man diese Gleichung über p, so wird $\mathrm{P}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}p}{\frac{p^2}{2m} - E} = 0$,

und man erhält

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} u_E(p)\,\mathrm{d}p = C_1 + C_2. \tag{e}$$

Setzt man dieses Ergebnis in Gl. (b) ein, so hat man die Eigenfunktionen $u_E(p)$ für $E > 0$ vorliegen, deren physikalische Bedeutung für die Streuung eines Teilchens (Kap. 4.7) an dem vorliegenden Potential in Aufg. 121 besprochen wird.

Es ist nützlich, sich den Zusammenhang mit der Ortsdarstellung

$$u_E(x) = \begin{cases} A_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + A_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & \text{für} \quad x < 0 \\ B_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & \text{für} \quad x > 0 \end{cases} \qquad \left(\hbar k = \sqrt{2mE}\right) \tag{f}$$

zu überlegen. Die Grenzbedingungen (1.4–15) ergeben

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2,$$

$$B_1 - B_2 - (A_1 - A_2) = 2a(A_1 + A_2) \quad \text{mit} \quad a = \mathrm{i}\frac{m\hat{V}}{\hbar^2 k}$$

oder

$$B_1 = (1 + a)\,A_1 + a A_2,$$

$$B_2 = -a A_1 + (1 - a)\,A_2.$$

Die Fourier-Transformation der Lösung (f) liefert, wenn man Gl. (5.1–25, 46 u. 47) berücksichtigt,

$$u_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}px}\, u_E(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Bigg\{A_1 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}(p-\hbar k)x}\,\mathrm{d}x + A_2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}(p+\hbar k)x}\,\mathrm{d}x$$

$$+ a(A_1 + A_2)\left(\int\limits_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}(p-\hbar k)x}\,\mathrm{d}x - \int\limits_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}(p+\hbar k)x}\,\mathrm{d}x\right)\Bigg\}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\, m\hat{V}(A_1 + A_2)\,\mathrm{P}\,\frac{1}{p^2 - \hbar^2k^2} + \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2}}\,(A_1 + B_1)\,\delta(p - \hbar k)$$

$$+ \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2}}\,(A_2 + B_2)\,\delta(p + \hbar k),$$

was mit Gl. (b) und (e) übereinstimmt, wenn man

$$C_1 = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2}}\,(A_1 + B_1) \quad \text{und} \quad C_2 = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2}}\,(A_2 + B_2) \tag{g}$$

setzt.

***92,** S. 280: a) Wendet man $\vec{x}\,\mathscr{D}^{-1} = \mathscr{D}^{-1}\,\vec{x}'(\vec{x})$ auf die Ortseigenvektoren $|u_{\mathfrak{r}}\rangle$ an, so ergibt sich

$$\vec{x}\,|\,\mathscr{D}^{-1} u_{\mathfrak{r}}\rangle = \mathscr{D}^{-1}\,\vec{x}'(\vec{x})\,|u_{\mathfrak{r}}\rangle = \mathfrak{r}'(\mathfrak{r})\,|\,\mathscr{D}^{-1} u_{\mathfrak{r}}\rangle,$$

d. h. $|\mathscr{D}^{-1} u_\mathfrak{r}\rangle$ ist Eigenvektor von $\vec{x}$ zum Eigenwert $\mathfrak{r}'$; es gilt also bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor

$$\boxed{|\mathscr{D}^{-1} u_\mathfrak{r}\rangle = |u_{\mathfrak{r}'}\rangle}\,. \tag{a}$$

In der Ortsdarstellung erhält man damit als Wirkung von $\mathscr{D}$

$$\langle u_\mathfrak{r} \mid \mathscr{D}\varphi\rangle = \langle \mathscr{D}^{-1} u_\mathfrak{r} \mid \varphi\rangle = \langle u_{\mathfrak{r}'} \mid \varphi\rangle$$

oder

$$\boxed{\mathscr{D}\varphi(\mathfrak{r}) = \varphi(\mathfrak{r}')}\,. \tag{b}$$

Das heißt, die Funktion $\mathscr{D}\varphi$ hat an der Stelle $\mathfrak{r}$ denselben Wert wie die Funktion φ an der Stelle $\mathfrak{r}'$.

Identifiziert man $\mathscr{D}$ insbesondere mit dem *Drehoperator* $\mathscr{R}_\mathfrak{e}(\alpha)$ [3.6 § 6], so ist $\mathfrak{r}'$ jener Ortsvektor, der aus $\mathfrak{r}$ durch eine Drehung $-\alpha$ um die Richtung $\mathfrak{e}$ entsteht. Der Fall, daß $\mathscr{D}$ durch den *Translationsoperator* $\mathscr{T}$ realisiert wird, ist bereits in Aufg. 84 behandelt worden.

b) Um die Invarianz des HAMILTON-Operators in der Ortsdarstellung kennenzulernen, gehen wir von

$$\langle u_\mathfrak{r} \mid \mathscr{H}\varphi\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\mathfrak{r} + V(\mathfrak{r})\right)\varphi(\mathfrak{r})$$

aus. Für $\mathscr{D}\mathscr{H}\mathscr{D}^{-1}$ erhalten wir in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned}\langle u_\mathfrak{r} | \mathscr{D}\mathscr{H}\mathscr{D}^{-1}\varphi\rangle &= \langle \mathscr{D}^{-1} u_\mathfrak{r} \mid \mathscr{H}\mathscr{D}^{-1}\varphi\rangle = \langle u_{\mathfrak{r}'} \mid \mathscr{H}\psi\rangle \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}'} + V(\mathfrak{r}')\right)\psi(\mathfrak{r}')\,.\end{aligned}$$

Dabei wurde $|\mathscr{D}^{-1}\varphi\rangle = |\psi\rangle$ gesetzt. Es gilt

$$\psi(\mathfrak{r}') = \langle u_{\mathfrak{r}'} \mid \mathscr{D}^{-1}\varphi\rangle = \langle \mathscr{D}^{-1} u_\mathfrak{r} \mid \mathscr{D}^{-1}\varphi\rangle = \langle u_\mathfrak{r} \mid \varphi\rangle = \varphi(\mathfrak{r}),$$

so daß die *Invarianzbedingung des* HAMILTON-*Operators*,

$$\mathscr{D}\mathscr{H}\mathscr{D}^{-1} = \mathscr{H},$$

in der Ortsdarstellung lautet

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\mathfrak{r} + V(\mathfrak{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}'} + V(\mathfrak{r}')}\,, \tag{c}$$

d. h., dieser Differentialausdruck muß an den Stellen $\mathfrak{r}$ und $\mathfrak{r}'$ übereinstimmen.

93, S. 282: Aus

$$\overset{\circ}{\mathscr{b}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{H}, \mathscr{b}]$$

folgt

$$\overset{\circ}{\mathscr{b}} = \mathrm{i}\,\omega[\varkappa, \mathscr{b}] = -\,\mathrm{i}\,\omega\,\mathscr{b}$$

und entsprechend

$$\overset{\circ}{\mathscr{b}}{}^\dagger = +\mathrm{i}\,\omega\,\mathscr{b}^\dagger.$$

Diese Gleichungen sind lediglich eine andere Schreibweise der HAMILTONschen Gleichungen

$$\overset{\circ}{x} = \frac{p}{m}, \quad \overset{\circ}{p} = -m\omega^2 x,$$

denn die Definitionsgleichung (4.2–3) liefert

$$\overset{\circ}{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\overset{\circ}{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\omega}}\,\overset{\circ}{p}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\frac{p}{m} - \mathrm{i}\sqrt{m\omega}\;\omega x\right) = -\mathrm{i}\,\omega\, b.$$

Im HEISENBERG-Bild lautet die Bewegungsgleichung von $b^H(t)$

$$\frac{\mathrm{d}b^H(t)}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\,\omega\, b^H(t)$$

mit der Lösung

$$b^H(t) = b^H(t_0)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_0)}.$$

Dies ist nichts anderes als eine Zusammenfassung der in Aufg. 74 hergeleiteten Dynamik von $x^H(t)$ und $p^H(t)$.

94, S. 285: Aus Gl. (4.2–20) folgt

$$|b^q u_n\rangle = b^{q-1}\,|\,b u_n\rangle = \sqrt{n}\; b^{q-1}\,|u_{n-1}\rangle = \sqrt{n(n-1)}\; b^{q-2}|\,u_{n-2}\rangle$$
$$= \sqrt{n(n-1)\cdots(n-q+1)}\;|u_{n-q}\rangle.$$

Es ist also

$$c(n,q) = \sqrt{n(n-1)\cdots(n-q+1)}\,.$$

Entsprechend liefert Gl. (4.2–21)

$$c'(n,q) = \sqrt{(n+1)(n+2)\cdots(n+q)}\,.$$

****95,*** S. 285: Wäre der tiefste Energieterm t-fach, d. h. gehörten zu ihm die Eigenvektoren $|u_0^\mu\rangle$ ($\mu = 1, \ldots, t$), so folgt aus den Eigenschaften von b und $b^\dagger$, daß dann auch alle höheren Terme dieselbe Vielfachheit hätten. Um zu beweisen, daß $t = 1$ sein muß, betrachten wir die Projektoren

$$\mathscr{P}_\mu = \sum_{n=0}^{\infty} |u_n^\mu\rangle\langle u_n^\mu| \quad \text{mit} \quad \sum_{\mu=1}^{t} \mathscr{P}_\mu = 1\,.$$

Dann gilt

$$[\mathscr{P}_\mu, b] = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}\,|u_n^\mu\rangle\langle u_{n+1}^\mu| - \sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{n}\,|u_{n-1}^\mu\rangle\langle u_n^\mu|$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\sqrt{n+1}\,|u_n^\mu\rangle\langle u_{n+1}^\mu| - \sqrt{n+1}\,|u_n^\mu\rangle\langle u_{n+1}^\mu|\right) = 0.$$

Ebenso ergibt sich $[\mathscr{P}_\mu, b^\dagger] = 0$. Daher vertauschen alle $\mathscr{P}_\mu$ auch mit x und p

$$[\mathscr{P}_\mu, x] = 0, \quad [\mathscr{P}_\mu, p] = 0,$$

d. h., es muß

$$\mathscr{P}_\mu = c_\mu 1$$

sein. Aus $\mathcal{P}_\mu^2 = \mathcal{P}_\mu$ ergibt sich, daß die Zahlen c_μ nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Wegen $\sum \mathcal{P}_\mu = 1$ muß $\sum c_\mu = 1$ sein, was nur erfüllbar ist, wenn ein c Eins ist und alle anderen Null sind. Es gibt also nur *einen* Operator $\mathcal{P}$, für den gilt

$$\mathcal{P} = \sum_{n=0}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n| = 1,$$

d. h., die $|u_n\rangle$ sind vollständig.

***96,** S. 285: Der explizit zeitabhängige HAMILTON-Operator lautet

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - x\,K(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2}{2}x^2 - x\,K(t)$$

$$= \hbar\omega\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}1\right) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(b + b^\dagger)\,K(t),$$

so daß gilt

$$\mathring{b} = -\mathrm{i}\omega\,b + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,K(t)\,1.$$

Im HEISENBERG-Bild ergibt sich hieraus

$$b^H(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\{b^H(0) + G(t)\,1\} \tag{a}$$

mit

$$G(t) = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\,K(t')\,\mathrm{d}t'.$$

Der Operator $\mathcal{H}_0^H$ ist wegen der Störung nicht mehr konstant; seine Zeitabhängigkeit ist durch

$$\mathcal{H}_0^H(t) = \hbar\,\omega\left(b^{H\dagger}(t)\;b^H(t) + \frac{1}{2}1\right)$$

gegeben. Seine Eigenwerte $E_n = \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ sind zeitunabhängig (weil $\mathcal{H}_0$ nicht explizit von der Zeit abhängt), die zugehörigen Eigenvektoren $|u_n^H(t)\rangle$ hingegen sind Zeitfunktionen

$$|u_n^H(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,b^{H\dagger}(t)^n\,|u_0^H(t)\rangle. \tag{b}$$

Zur Zeit $t = 0$ soll die Energie E_0 vorliegen, d. h., es ist $|\Phi^H\rangle = |u_0^H(0)\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit, daß dann im Zeitpunkt t der Oszillator die Energie E_n besitzt, ist gegeben durch

$$w_n(t) = |\langle u_n^H(t)\,|\,u_0^H(0)\rangle|^2.$$

Nach Einsetzen von Gl. (a) und (b) ergibt sich

$$w_n(t) = \frac{1}{n!}\,|G(t)|^{2n}\cdot|\langle u_0^H(t)\,|\,u_0^H(0)\rangle|^2.$$

Weil die Summe aller Wahrscheinlichkeiten eins sein muß,

$$\sum_n w_n(t) = \mathrm{e}^{|G(t)|^2}\cdot|\langle u_0^H(t)\,|\,u_0^H(0)\rangle|^2 = 1,$$

folgt schließlich

$$w_n(t) = \frac{1}{n!}\,|G(t)|^{2n}\,\mathrm{e}^{-|G(t)|^2}.$$

***97**, S. 285: Als Funktion des Geschwindigkeitsoperators [Gl. (3.2–43)]

$$\vec{v} = \frac{1}{m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\mathfrak{A}(\vec{x})\right)$$

lautet der HAMILTON-Operator eines Teilchens im Magnetfeld [Gl. (3.2–44)]

$$\mathscr{H} = \frac{m}{2}(v_1^2 + v_2^2 + v_3^3).$$

Legen wir die Richtung des homogenen Magnetfeldes B in die 3-Richtung, so gelten nach Gl. (3.2–45) zwischen den Geschwindigkeitskomponenten die Vertauschungsrelationen

$$[v_1, v_2] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{q}{m^2 c} B\,\mathbb{1}, \quad [v_2, v_3] = [v_3, v_1] = \mathbb{O}.$$

Der Teil-HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H}_\perp = \frac{m}{2}(v_1^2 + v_2^2),$$

der von dem Anteil der Bewegung senkrecht zum Magnetfeld herrührt, *vertauscht* also mit

$$\mathscr{H}_{||} = \frac{m}{2}v_3^2 = \frac{1}{2m}p_3^2$$

[$A_3 = 0$, wegen Gl. (1.2–85)].

Das Eigenwertproblem von $\mathscr{H}_\perp$ ist zu dem des Oszillators äquivalent. Setzen wir nämlich

$$b = \sqrt{\frac{m^2 c}{2\hbar q B}}(v_1 + \mathrm{i}\, v_2),$$

so erhalten wir

$$\mathscr{H}_\perp = \frac{\hbar q B}{m c}\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right)$$

mit der Vertauschungsrelation

$$[b, b^\dagger] = \mathbb{1}.$$

Die Eigenwerte lauten daher

$$E_\perp = \frac{\hbar q B}{m c}\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

Weil $\mathscr{H}_{||}$ die kinetische Energie einer eindimensionalen, kräftefreien Bewegung ist, sind die Eigenwerte positiv kontinuierlich,

$$E_{||} = \frac{p_3^2}{2m} \geqq 0 \qquad (-\infty < p_3 < +\infty).$$

Für die Gesamtenergie eines geladenen Teilchens (ohne Spin) im Magnetfeld ergibt sich damit

$$E = E_{||} + E_\perp = \frac{\hbar q B}{m c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_3^2}{2m}.$$

Die zugehörigen Eigenvektoren sind direkte Produkte (2.4 § 1) aus Oszillator- und p_3-Eigenvektoren.

98, S. 286: Aus den Gln. (4.2–30) und (4.2–31) folgt

$$\frac{1}{2m}(p^2)_{nn'} = \frac{1}{2m}\sum_m p_{nm}p_{mn'} = \frac{\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & -\sqrt{12} & \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \\ 0 & 0 & -\sqrt{12} & 0 & 9 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

und

$$\frac{m\omega^2}{2}(x^2)_{nn'} = \frac{m\omega^2}{2}\sum_m x_{nm}x_{mn'} = \frac{\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{12} & \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{12} & 0 & 9 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Also ist

$$H_{nn'} = \frac{1}{2m}(p^2)_{nn'} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2)_{nn'} = \hbar\omega\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & & \mathbf{0} \cdots & \\ & \frac{3}{2} & & \\ & & \frac{5}{2} & \\ \mathbf{0} & & & \frac{7}{2} \ddots \end{pmatrix} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{nn'}.$$

Ebenso erhält man

$$(px)_{nn'} = \sum_m p_{nm}x_{mn'} = \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \\ -\sqrt{2} & 0 & 1 & 0 & \sqrt{12} & \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & -\sqrt{12} & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

und

$$(xp)_{nn'} = \sum_m x_{nm}p_{mn'} = -\frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \\ \sqrt{2} & 0 & 1 & 0 & -\sqrt{12} & \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{12} & 0 & 1 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

so daß sich ergibt

$$(px - xp)_{nn'} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & \mathbf{0} & \\ & & 1 & & \\ & \mathbf{0} & & 1 & \\ & & & & 1 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \delta_{nn'}.$$

99, S. 286: Die Ortsunschärfe im Energiezustand $|\Phi\rangle = |u_n\rangle$ des Oszillators ist nach Gl. (3.3–26) und Aufg. 98

$$\Delta x = \sqrt{(x^2)_{nn} - (x_{nn})^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)}\,.$$

Entsprechend gilt für die Impulsunschärfe

$$\Delta p = \sqrt{(p^2)_{nn} - (p_{nn})^2} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)}\,.$$

Für das Produkt $\Delta x\, \Delta p$ erhält man damit

$$\Delta x\, \Delta p = (2n+1)\frac{\hbar}{2} \geqq \frac{\hbar}{2}\,.$$

Im Grundzustand ($n = 0$) gilt also das Gleichheitszeichen (vgl. Aufg. 88).

Die Ergebnisse dieser Aufgabe kann man auch gewinnen, wenn man einerseits beachtet, daß wegen

$$x = -\frac{1}{m\omega^2}\mathring{p} \qquad \text{und} \qquad p = m\mathring{x}$$

die Erwartungswerte $\langle x\rangle, \langle p\rangle$ im Energiezustand nach Aufg. 59 verschwinden, und daß andererseits nach Aufg. 72

$$\langle x^2\rangle = \frac{2}{m\omega^2}\langle \mathcal{V}\rangle = \frac{1}{m\omega^2}E_n = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1),$$

$$\langle p^2\rangle = 2m\langle \mathcal{T}\rangle = mE_n = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

ist.

100, S. 298: Aus Gl. (4.3–28$_1$) folgt

$$\langle \mathcal{J}_x\rangle = \langle u_J^M \mid \mathcal{J}_x u_J^M\rangle = 0$$

und

$$\Delta J_x = \sqrt{\langle \mathcal{J}_x^2\rangle - \langle \mathcal{J}_x\rangle^2} = \sqrt{\langle u_J^M \mid \mathcal{J}_x^2 u_J^M\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}\{J(J+1) - M^2\}}\,.$$

101, S. 298: Weil in den Vertauschungsrelationen des Drehimpulses keine Komponente ausgezeichnet ist, hat $\mathcal{J}_x$ — und allgemein jede Komponente $\mathbf{e}\,\vec{\mathcal{J}}$ — dieselben Eigenwerte $M\hbar$ wie $\mathcal{J}_z$. Die Eigenwertgleichung von $\mathcal{J}_x$ in der $\mathcal{J}_z$-Darstellung lautet

$$\sum_{M''} \langle u_J^{M'\,z} \mid \mathcal{J}_x u_J^{M''\,z}\rangle \langle u_J^{M''\,z} \mid u_J^{M\,x}\rangle = M\hbar \langle u_J^{M'\,z} \mid u_J^{M\,x}\rangle.$$

Nach Gl. (4.3–30$_1$) entsteht hieraus für $J = 1$ das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\langle u^{0\,z} \mid u^{M\,x}\rangle &&= M\hbar\,\langle u^{+\,z} \mid u^{M\,x}\rangle, \quad (M' = +1)\\
&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\Big(\langle u^{+\,z} \mid u^{M\,x}\rangle + \langle u^{-\,z} \mid u^{M\,x}\rangle\Big) &&= M\hbar\,\langle u^{0\,z} \mid u^{M\,x}\rangle, \quad (M' = 0)\\
&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\langle u^{0\,z} \mid u^{M\,x}\rangle &&= M\hbar\,\langle u^{-\,z} \mid u^{M\,x}\rangle, \quad (M' = -1)
\end{aligned}$$

für die Komponenten von $|u^{M\,x}\rangle$[1]. Zusammen mit der Normierungsbedingung erhält man (bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor)

$$\left.\begin{aligned}
|u^{+\,x}\rangle &= \frac{1}{2}|u^{+\,z}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u^{0\,z}\rangle + \frac{1}{2}|u^{-\,z}\rangle,\\
|u^{0\,x}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|u^{+\,z}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|u^{-\,z}\rangle,\\
|u^{-x}\rangle &= \frac{1}{2}|u^{+\,z}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|u^{0\,z}\rangle + \frac{1}{2}|u^{-\,z}\rangle.
\end{aligned}\right\}(J = 1).$$

In der Versuchsanordnung Fig. 52 (S. 186) wird durch den ersten STERN-GERLACH-Apparat der Eigenwert $+\hbar$ von $\mathscr{J}_z$ gemessen, d. h. $|\Phi'\rangle = |u^{+\,z}\rangle$. Für die Wahrscheinlichkeit dafür, daß bei der darauffolgenden Messung von $\mathscr{J}_x$ die Werte $+\hbar$, 0, $-\hbar$ gefunden werden, erhalten wir

$$\begin{aligned}
w^{+\,x} &= |\langle u^{+x} \mid u^{+\,z}\rangle|^2 = \frac{1}{4},\\
w^{0\,x} &= |\langle u^{0\,x} \mid u^{+\,z}\rangle|^2 = \frac{1}{2},\\
w^{-\,x} &= |\langle u^{-\,x} \mid u^{+\,z}\rangle|^2 = \frac{1}{4}.
\end{aligned}$$

In der Versuchsanordnung Fig. 55 (S. 190) wird durch die zweite STERN-GERLACH-Apparatur der Eigenwert $+\hbar$ von $\mathscr{J}_x$ gemessen, d. h. $|\Phi''\rangle = |u^{+x}\rangle$. Die Wahrscheinlichkeiten für die darauffolgende $\mathscr{J}_z$-Messung sind

$$\begin{aligned}
w^{+\,z} &= |\langle u^{+\,z} \mid u^{+x}\rangle|^2 = \frac{1}{4},\\
w^{0\,z} &= |\langle u^{0\,z} \mid u^{+\,x}\rangle|^2 = \frac{1}{2},\\
w^{-\,z} &= |\langle u^{-\,z} \mid u^{+\,x}\rangle|^2 = \frac{1}{4}.
\end{aligned}$$

***102*, S. 304: Bei *Drehungen* transformiert sich sowohl der Ortsvektor $\vec{x}$ als auch der Vektor des magnetischen Moments $\vec{m}$ nach der Darstellung $\Gamma_{l=1}$ von $O(3)$. Nach 3.6 § 8 können daher höchstens die Matrixelemente mit

$$l' - l \equiv \Delta l = 0, \ \pm 1 \tag{a}$$

[1]) Man verifiziert sofort, daß die Determinante dieses homogenen Gleichungssystems in der Tat die Eigenwerte $M = 1, 0, -1$ besitzt.

von Null verschieden sein. Außerdem verschwinden die Matrixelemente, wenn $l = l' = 0$ ist.

Beachtet man ferner, daß bei der *Inversion* der Ortsoperator $\vec{x}$ sein Vorzeichen wechselt [Gl. (3.6–14)] und $|u_{\gamma l}^{m}\rangle$ die Parität $(-1)^l$ besitzt, so können nur jene Matrixelemente von $\vec{x}$ nicht Null sein, für die

$$(-1)^{l'+1+l} = 1 \tag{b}$$

oder

$$\Delta l = \text{ungerade} \tag{b'}$$

ist (LAPORTE*sche Regel*). Dieser Sachverhalt, der direkt aus 3.6 § 8 folgt, läßt sich auch aus der Ortsdarstellung ersehen, weil das Integral über den Ortsraum verschwindet, wenn der gesamte Integrand bei $\mathfrak{r} \to -\mathfrak{r}$ sein Vorzeichen wechselt (was der Fall wäre, wenn in (b) -1 stünde). — Das magnetische Moment $\vec{m}$ verändert als axialer Vektor bei der Inversion sein Vorzeichen nicht [Gl. (3.6–15)]. Daher können nur jene Matrixelemente von $\vec{m}$ nicht verschwinden, für die

$$(-1)^{l'+l} = 1 \tag{c}$$

oder

$$\Delta l = \text{gerade} \tag{c'}$$

ist.

Um Aussagen über die magnetischen Quantenzahlen m zu bekommen, betrachten wir die *Drehungen* α *um die Quantisierungsachse* (x_3-Achse). Dabei bleibt sowohl die Komponente x_3 als auch jene von m_3 invariant, während $|u_{\gamma l}^{m}\rangle$ nach Gl. (3.6–27) den Faktor $e^{-im\alpha}$ bekommt. Die Matrixelemente von x_3 oder m_3 können daher nur dann von Null verschieden sein, wenn

$$e^{i(m'-m)\alpha} = 1$$

gilt, d. h.

$$\Delta m = 0. \tag{d}$$

Die Linearkombinationen $x_\pm = x_1 \pm i\, x_2$ bzw. $m_\pm = m_1 \pm i\, m_2$ nehmen nach Gl. (3.6–36) bei der Drehung α um die x_3-Achse den Faktor $e^{\mp i\alpha}$ auf, so daß

$$e^{i(m'\mp 1-m)\alpha} = 1$$

sein muß, oder

$$\Delta m = \pm 1. \tag{e}$$

Fassen wir alle Ergebnisse zusammen, so erhalten wir die *Auswahlregeln*

$$\boxed{\langle u_{\gamma' \, l\pm 1}^{\;m} \,|\, x_3 \, u_{\gamma l}^{m}\rangle \neq 0, \quad \langle u_{\gamma' \, l\pm 1}^{\;m\pm 1} \,|\, x_\pm \, u_{\gamma l}^{m}\rangle \neq 0} \;{}^{1)} \tag{f}$$

und

$$\boxed{\langle u_{\gamma' l}^{\;m} \,|\, m_3 \, u_{\gamma l}^{m}\rangle \neq 0, \quad \langle u_{\gamma' l}^{\;m\pm 1} \,|\, m_\pm \, u_{\gamma l}^{m}\rangle \neq 0} \quad (l \neq 0).\;{}^{1)} \tag{g}$$

[1]) Für spezielle $|u_{\gamma l}^{m}\rangle$ können natürlich auch von diesen Matrixelementen noch einige „zufällig" Null sein.

***103*, S. 310:** a) Wegen Gl. (4.3–105 u. 106) gilt für $s = 1/2$

$$(\vec{e}\,\vec{\sigma})^{2n} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2n} 1 \quad \text{und} \quad (\vec{e}\,\vec{\sigma})^{2n+1} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2n} \vec{e}\,\vec{\sigma},$$

so daß sich der Drehoperator [Gl. (3.6–32)]

$$\mathscr{R}_e(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(\vec{e}\,\vec{\sigma})} = \cos\frac{\alpha}{\hbar}(\vec{e}\,\vec{\sigma}) - i \sin\frac{\alpha}{\hbar}(\vec{e}\,\vec{\sigma})$$

vereinfacht zu

$$\boxed{\mathscr{R}_e(\alpha) = \cos\frac{\alpha}{2} - i\,\frac{2(\vec{e}\,\vec{\sigma})}{\hbar}\sin\frac{\alpha}{2}}\,. \qquad \left(s = \frac{1}{2}\right) \tag{a}$$

b) Bei einer 90°-Drehung des Koordinatensystems um die y-Achse ist

$$\sigma_z' = \sigma_x = \mathscr{R}_y\left(\frac{\pi}{2}\right)\sigma_z\,\mathscr{R}_y^{-1}\left(\frac{\pi}{2}\right).$$

Damit erhalten wir nach Gl. (3.6–3) die Eigenvektoren $|u^{\pm x}\rangle$ von σ_x aus jenen von σ_z durch Anwendung von $\mathscr{R}_y\left(\frac{\pi}{2}\right)$

$$\begin{aligned}|u^{\pm x}\rangle &= \mathscr{R}_y\left(\frac{\pi}{2}\right)|u^{\pm z}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{2i}{\hbar}\sigma_y\right)|u^{\pm z}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{1}{\hbar}\sigma_+ + \frac{1}{\hbar}\sigma_-\right)|u^{\pm z}\rangle,\end{aligned}$$

so daß Gl. (4.3–99) liefert

$$\left.\begin{aligned}|u^{+x}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u^{+z}\rangle + |u^{-z}\rangle), \\ |u^{-x}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u^{-z}\rangle - |u^{+z}\rangle).\end{aligned}\right\} \tag{b}$$

Zu demselben Ergebnis gelangt man natürlich auch, wenn man die Eigenwertgleichung von σ_x in der σ_z-Darstellung löst.

c) Wenn durch eine Messung von σ_z der Eigenwert $+\hbar/2$ festgestellt wurde, sind die Werte $\pm\hbar/2$ einer σ_x-Messung gleich wahrscheinlich,

$$\begin{aligned}w^{+x} &= |\langle u^{+x} \,|\, u^{+z}\rangle|^2 = \frac{1}{2}, \\ w^{-x} &= |\langle u^{+x} \,|\, u^{-z}\rangle|^2 = \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

****104* S. 310:** Weil jede zweidimensionale HERMITEsche Matrix durch 4 unabhängige, reelle Zahlen beschrieben wird (Aufg. 40), läßt sie sich als eine Linearkombination der Matrizen von $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ darstellen. Wir können also für den statistischen Operator

schreiben

$$\rho = a_1 \mathbf{1} + a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_z .$$

Wegen

$$\mathrm{Sp}\, \mathbf{1} = 2, \qquad \mathrm{Sp}\, \sigma_i = 0, \qquad \mathrm{Sp}\, (\sigma_i \sigma_k) = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ik},$$

ergibt sich

$$1 = \mathrm{Sp}\, \rho = a_1 \,\mathrm{Sp}\, \mathbf{1} = 2a_1,$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \mathrm{Sp}\, \sigma_i \rho = a_i \,\mathrm{Sp}\, \sigma_i^2 = a_i \frac{\hbar^2}{2},$$

so daß wir erhalten

$$\boxed{\rho = \frac{1}{2} \mathbf{1} + \frac{2}{\hbar^2} \langle \vec{\sigma} \rangle \vec{\sigma}} .$$

105, S. 313: Der HAMILTON-Operator $\mathscr{H} = -\gamma \vec{\sigma} \mathfrak{B}$ hat nach Gl. (4.3–101) in der σ_z-Darstellung die Matrixelemente

$$H^{mm'} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_- \\ B_+ & -B_0 \end{pmatrix},$$

wenn wir $B_\pm = B_x \pm \mathrm{i} B_y = B_1 \mathrm{e}^{\mp \mathrm{i} \omega t}$ setzen. Die SCHRÖDINGER-Gleichung (3.5–44) für die Wahrscheinlichkeitsamplituden $\Phi^m(t) = \langle u^m \mid \Phi \rangle$,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Phi^m = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{m'} H^{mm'} \Phi^{m'},$$

nimmt daher die Gestalt

$$\frac{\mathrm{d}\Phi^+}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}\gamma}{2} (B_0 \Phi^+ + B_- \Phi^-)$$

$$\frac{\mathrm{d}\Phi^-}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}\gamma}{2} (B_+ \Phi^+ - B_0 \Phi^-)$$

an. Mit der Anfangsbedingung $\Phi^+(0) = 1, \quad \Phi^-(0) = 0$ erhält man die Lösung

$$\Phi^-(t) = \frac{-\mathrm{i}\gamma B_1}{\sqrt{(\omega - \gamma B_0)^2 + (\gamma B_1)^2}} \sin \frac{\sqrt{(\omega - \gamma B_0)^2 + (\gamma B_1)^2}\, t}{2} .$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß zur Zeit t der Zustand $m = -\frac{1}{2}$ vorliegt,

$$w^-(t) = |\Phi^-(t)|^2,$$

oszilliert also zeitlich. Hat das Wechselfeld die *Resonanzfrequenz* $\omega = \gamma B_0$, so wird in den Zeitpunkten

$$t_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\gamma B_1}, \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

die Wahrscheinlichkeit $w^-(t_n) = 1$.
(Beim RABI-Versuch wird dieses Ergebnis zur Bestimmung von Kernmomenten benutzt.)

106, S. 313: Die Magnetisierung im thermischen Gleichgewicht ist der Erwartungswert des Magnetisierungsoperators, gebildet mit dem kanonischen statistischen Operator [Gl. (3.7–31)],

$$M(H, T) = \langle \mathscr{M} \rangle = \frac{\mathrm{Sp}\, \mathscr{M}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}(H)}}{\mathrm{Sp}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}(H)}}, \qquad \left(\beta = \frac{1}{kT}\right)$$

wobei die Spur im Produktraum $\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2 \times \cdots \times \mathfrak{U}^N$ der N Spins zu berechnen ist. Legen wir das Magnetfeld H in die z-Richtung, so ist

$$\mathscr{H} = -\gamma H \sum_{\nu=1}^{N} \overset{\nu}{\sigma}_z \quad \text{und} \quad \mathscr{M} = \gamma \sum_{\nu=1}^{N} \overset{\nu}{\sigma}_z = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial H}.$$

Es genügt, die *Zustandssumme*

$$Z(\beta, H) = \mathrm{Sp}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}}$$

zu bestimmen, denn es ist

$$M = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial H}\right)_\beta.$$

Wir berechnen die Spur in den Produktzuständen $|u^{m_1} u^{m_2} \ldots u^{m_N}\rangle = |u^{m_1}\rangle |u^{m_2}\rangle \ldots |u^{m_N}\rangle$ und erhalten

$$Z = \sum_{m^1 m^2 \ldots m_N} \langle u^{m^1} u^{m^2} \ldots | \mathrm{e}^{\beta \gamma H \sigma_z^1} \mathrm{e}^{\beta \gamma H \sigma_z^2} \ldots | u^{m^1} u^{m^2} \ldots \rangle$$

$$= \sum_{m^1} \langle u^{m^1} | \mathrm{e}^{\beta \gamma H \sigma_z^1} u^{m^1} \rangle \sum_{m^2} \langle u^{m^2} | \mathrm{e}^{\beta \gamma H \sigma_z^2} u^{m^2} \rangle \ldots$$

$$= \left(\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2} \beta \gamma H} + \mathrm{e}^{-\frac{\hbar}{2} \beta \gamma H}\right)^N,$$

so daß sich für die Magnetisierung ergibt

$$M(H, T) = N \frac{\hbar \gamma}{2} \tanh \frac{\hbar \gamma H}{2 kT}.$$

Ist $\gamma \hbar H \ll kT$, so folgt das CURIEsche Gesetz

$$M(H, T) = N \frac{(\hbar \gamma)^2}{4k} \frac{H}{T}.$$

107, S. 318: Die in 4.3 § 6 angestellten Überlegungen lassen sich ohne weiteres auf die Spin-Addition

$$\vec{\mathscr{S}} = \vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)}$$

übertragen. Die gemeinsamen Eigenvektoren $|u_S^M\rangle$ von $\vec{\mathscr{S}}^2$ und $\mathscr{S}_z$,

$$\vec{\mathscr{S}}^2 | u_S^M \rangle = S(S+1) \hbar^2 | u_S^M \rangle,$$

$$\mathscr{S}_z | u_S^M \rangle = M\hbar | u_S^M \rangle,$$

entwickeln wir nach den Produktvektoren $|u^{m_1} u^{m_2}\rangle$ der Einzelspinzustände $|u^{m_1}\rangle$ und $|u^{m_2}\rangle$,

$$| u_S^M \rangle = \sum_{m^1, m^2} | u^{m_1} u^{m_2} \rangle\, C^{m_1 m_2}.$$

Aus Gl. (4.3–133) folgt, daß

$$S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$$

oder

$$S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$$

ist. Die Gln. (4.3–131, 134 u. 136) führen auf die Eigenvektoren

$$\left.\begin{aligned} |u^{M=1}_{S=1}\rangle &= |u^+u^+\rangle \\ |u^{M=0}_{S=1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|u^-u^+\rangle + |u^+u^-\rangle) \\ |u^{M=-1}_{S=1}\rangle &= (|u^-u^-\rangle \end{aligned}\right\} (\textit{Triplett})$$

und

$$|u^{M=0}_{S=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|u^-u^+\rangle + \;u^+u^-\rangle) \quad (\textit{Singulett}).$$

***108,** S. 326: Wir betrachten drei verschiedene, nicht entartete Eigenwerte $\varepsilon_a, \varepsilon_b, \varepsilon_c$ von $\hbar$ mit den Eigenvektoren $|u_a\rangle$, $|u_b\rangle$, $|u_c\rangle$. Der Eigenwert $E_0 = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c$ von $\mathscr{H}_0 = \sum_{\nu=1}^{3} \hbar^\nu$ ist dann $3! = 6$-fach. Die Produktzustände $|u_\gamma\rangle$

$$\left.\begin{aligned} |u_1\rangle &= |u_a^1 u_b^2 u_c^3\rangle, \qquad & |u_4\rangle &= |u_a^1 u_c^2 u_b^3\rangle \\ |u_2\rangle &= |u_b^1 u_c^2 u_a^3\rangle, & |u_5\rangle &= |u_c^1 u_b^2 u_a^3\rangle \\ |u_3\rangle &= |u_c^1 u_a^2 u_b^3\rangle, & |u_6\rangle &= |u_b^1 u_a^2 u_c^3\rangle \end{aligned}\right\} \quad \text{(a)}$$

spannen den 6-dimensionalen Eigenraum auf. Dieser ist Darstellungsraum (vgl. Kap. 5.4) einer reduziblen Darstellung ${}^6\Gamma$ der Permutationsgruppe S_3. Die zugehörigen Darstellungsmatrizen erhält man, indem man auf $|u_\gamma\rangle$ die sechs Permutationsoperatoren $\mathscr{P}_\varrho$ (S. 325) anwendet,

$$\mathscr{P}_\varrho |u_\gamma\rangle = \sum_{\gamma'=1}^{6} |u_{\gamma'}\rangle\, D_{\gamma'\gamma}(\varrho). \qquad \text{(b)}$$

Weil nach (a) z. B. $\mathscr{P}_{(12)(3)}|u_1\rangle = |u_a^2 u_b^1 u_c^3\rangle = |u_6\rangle$ usw. ist, ergibt sich für

$$\mathscr{P}_{(12)(3)}(|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle, |u_4\rangle, |u_5\rangle, |u_6\rangle) = (|u_6\rangle, |u_5\rangle, |u_4\rangle, |u_3\rangle, |u_2\rangle, |u_1\rangle),$$

d. h. nach Gl. (b)

$$D_{\gamma'\gamma}((12)\,(3)) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & & & & & 1 \\ & & & & 1 & \\ & & & 1 & & \\ & & 1 & & & \\ & 1 & & & \mathbf{0} & \\ 1 & & & & & \end{pmatrix}.$$

Verfährt man entsprechend mit allen übrigen Permutationsoperatoren, so sieht man, daß alle Darstellungsmatrizen auf der Hauptdiagonale lauter Nullen haben, mit Ausnahme natürlich der identischen Permutation $\boldsymbol{D}(e) = \boldsymbol{D}((1)\,(2)\,(3)) = \boldsymbol{1}$, bei der die Diagonale aus lauter Einsen besteht. Daher lautet das Charakterensy-

stem χ_r (vgl. 5.4 § 5) der durch (a) induzierten Darstellung ${}^6\Gamma$ von S_3

	$\mathfrak{C}_1$	$\mathfrak{C}_2$	$\mathfrak{C}_3$
${}^6\Gamma$	6	0	0

Die Ausreduktion nach den irreduziblen Darstellungen von S_3 [Gl. (5.4–40)] ergibt

$$ {}^6\Gamma = {}^1\Gamma_1 + {}^1\Gamma_2 + 2\,{}^2\Gamma_3 . $$

Schaltet man also eine in allen drei Teilsystemen symmetrische Wechselwirkung ein, so spaltet nach 3.6 § 7b der sechsfache Term in 2 einfache Terme (${}^1\Gamma_1$, ${}^1\Gamma_2$) und 2 zweifache Terme (${}^2\Gamma_3$) auf.

Die obigen Überlegungen lassen sich ohne weiteres auf N Teilsysteme erweitern: Die Produktvektoren $|u_\gamma\rangle$ induzieren wieder eine reduzible Darstellung ${}^{N!}\Gamma$ der Permutationsgruppe S_N, deren Charaktere alle Null sind, mit Ausnahme von $\chi(e) = N!$ (man nennt diese Darstellung *regulär*). Aus Gl. (5.4–38) folgt, weil S_N die Ordnung $N!$ hat,

$$ q_k = \frac{1}{N!}(\chi(e)\,\chi_k^*(e) + 0 + \cdots) = \frac{1}{N!} N!\, t_k = t_k , $$

d. h., jede irreduzible Darstellung kommt in ${}^{N!}\Gamma$ bei der Ausreduktion gerade so oft vor, wie ihre Dimension beträgt.

109, S. 332: Geht man von einer Basis $|v_k\rangle$ des unitären Raumes *eines* Elektrons zu einer anderen Basis über, z. B. zu den Orts- und Spin-Eigenvektoren $|u_{\mathfrak{r}m}\rangle = |u_{\mathfrak{r}}\rangle\,|u_{\frac{1}{2}}^{m}\rangle$, so gilt

$$ |v_k\rangle = \sum_m \int_{\mathfrak{r}} |u_{\mathfrak{r}m}\rangle\langle u_{\mathfrak{r}m}|v_k\rangle\,\mathrm{d}^3x . $$

Für die Vektoren des direkten Produktraumes ergibt sich hieraus die Transformation

$$ |\overset{1}{v}_{k_1}\ldots\overset{N}{v}_{k_N}\rangle = \sum_{m_1\ldots m_N}\int_{\mathfrak{r}_1\ldots\mathfrak{r}_N} |\overset{1}{u}_{\mathfrak{r}_1m_1}\ldots\overset{N}{u}_{\mathfrak{r}_Nm_N}\rangle\langle u_{\mathfrak{r}_1m_1}|v_{k_1}\rangle\ldots\langle u_{\mathfrak{r}_Nm_N}|v_{k_N}\rangle\,\mathrm{d}^3x_1\ldots\mathrm{d}^3x_N . $$

Wendet man auf diese Gleichung $\sqrt{N!}\,\mathscr{A}$ an, so erhält man im $\mathfrak{U}_N^-$

$$ |v^-_{k_1\ldots k_N}\rangle = \sum_{m_1\ldots m_N}\int_{\mathfrak{r}_1\ldots\mathfrak{r}_N} |u^-_{\mathfrak{r}_1m_1\ldots\mathfrak{r}_Nm_N}\rangle\langle u_{\mathfrak{r}_1m_1}|v_{k_1}\rangle\ldots\langle u_{\mathfrak{r}_Nm_N}|v_{k_N}\rangle\,\mathrm{d}^3x_1\ldots\mathrm{d}^3x_N . $$

****110***, S. 332: a) Im Fall der *j–j-Kopplung* geht man von dem Einteilchen-HAMILTON-Operator [Gl. (4.3–137)]

$$ h_{ls} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \mathscr{V}(r) + \xi(r)\,\vec{l}\,\vec{s} \tag{a} $$

aus, in dem durch den Term $\xi(r)\,\vec{l}\,\vec{s}$ der Spin-Bahn-Kopplung Rechnung getragen wird. Der Operator h_{ls} vertauscht mit $\vec{j}^{\,2}$ und j_z (vgl. 4.3 § 6), so daß man solche Energieeigenvektoren $|u_{\gamma\,j}^{\,m}\rangle$ wählen kann, die gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{j}^{\,2}$ und j_z sind

$$ h_{ls}|u_{\gamma j}^{m}\rangle = \varepsilon_{\gamma j}|u_{\gamma j}^{m}\rangle . \tag{b} $$

Nun betrachten wir zwei gleiche Fermionen mit einer kugelsymmetrischen Wechselwirkung h^{12}, die wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen auch permutations-

invariant sein muß, $\mathscr{h}^{12} = \mathscr{h}^{21}$, [Gl. (4.5–1)]. Zum Beispiel kann $\mathscr{h}^{12}$ die COULOMBsche Wechselwirkung sein. Der Gesamt-HAMILTON-Operator

$$\mathscr{H} = \mathscr{h}^1_{ls} + \mathscr{h}^2_{ls} + \mathscr{h}^{12}, \tag{c}$$

in dem $\mathscr{h}^1_{ls}$ und $\mathscr{h}^2_{ls}$ die Einteilchenoperatoren (a) bedeuten, hat dann Eigenvektoren $|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle$, die gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{\mathscr{J}}^2$ und $\mathscr{J}_z$ sind ($\vec{\mathscr{J}} = \vec{\mathscr{J}}^1 + \vec{\mathscr{J}}^2$),

$$\mathscr{H}\,|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle = E_{aJ}\,|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle. \tag{d}$$

Damit dem Fermionencharakter der Teilchen Rechnung getragen wird, müssen die Eigenvektoren $|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle$ antimetrisch gegen Teilchenvertauschung sein, d. h., sie müssen im unitären Raum $\mathfrak{U}_2^-$ liegen. Die Eigenvektoren $|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle$ lassen sich aus den Produkten der Einteilchenvektoren

$$|\overset{1}{u}_{\gamma_1}{}^{m_1}_{j_1}\rangle\,|\overset{2}{u}_{\gamma_2}{}^{m_2}_{j_2}\rangle$$

aufbauen. Die der kugelsymmetrischen Störung angepaßten Eigenvektoren nullter Näherung (vgl. Kap. 5.3 § 3) sind die mit den WIGNER-Koeffizienten (4.3 § 7) gebildeten Linearkombinationen

$$\boxed{|u_{\gamma_1\gamma_2 j_1 j_2}{}^{M}_{J}\rangle = \sum_{m_1 m_2} |\overset{1}{u}_{\gamma_1}{}^{m_1}_{j_1}\rangle\,|\overset{2}{u}_{\gamma_2}{}^{m_2}_{j_2}\rangle\, C^{m_1\, m_2\, M}_{j_1\, j_2\, J}}\,, \tag{e}$$

die gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{\mathscr{J}}^2$, $\mathscr{J}_z$, $\vec{\mathscr{j}}^{1\,2}$ und $\vec{\mathscr{j}}^{2\,2}$ sind. Wegen Gl. (4.3–142) sind die Werte von M und J beschränkt auf

$$\left.\begin{aligned} M &= m_1 + m_2 \\ J &= j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2|. \end{aligned}\right\} \tag{f}$$

Die exakten Eigenvektoren von $\mathscr{H}$ sind Linearkombinationen

$$\boxed{|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{\gamma_1\gamma_2} \sum_{j_1 j_2} |u_{\gamma_1\gamma_2, j_1 j_2}{}^{M}_{J}\rangle\, A_{\gamma_1\gamma_2, j_1 j_2}\, d\gamma_1\, d\gamma_2}\,, \tag{g}$$

wobei über jene Paare j_1 und j_2 zu summieren ist, die nach Gl. (f) denselben J-Wert ergeben. Die Koeffizienten A müssen solche Eigenschaften haben, daß die Eigenvektoren $|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle$ *antimetrisch* gegenüber Teilchenvertauschung sind

$$\mathscr{P}_{(12)}\,|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle = -\,|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle. \tag{h}$$

Wegen

$$\begin{aligned}
\mathscr{P}_{(12)}|u^{-}_{a}{}^{M}_{J}\rangle &= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{\gamma_1\gamma_2} \sum_{j_1 j_2} \sum_{m_1 m_2} |\overset{1}{u}_{\gamma_2}{}^{m_2}_{j_2}\rangle\,|\overset{2}{u}_{\gamma_1}{}^{m_1}_{j_1}\rangle\, C^{m_1\, m_2\, M}_{j_1\, j_2\, J}\, A_{\gamma_1\gamma_2, j_1 j_2}\, d\gamma_1\, d\gamma_2 \\
&= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{\gamma_1\gamma_2} \sum_{j_1 j_2} \sum_{m_1 m_2} |\overset{1}{u}_{\gamma_1}{}^{m_1}_{j_1}\rangle|\overset{2}{u}_{\gamma_2}{}^{m_2}_{j_2}\rangle\, C^{m_2\, m_1\, M}_{j_2\, j_1\, J}\, A_{\gamma_2\gamma_1, j_2 j_1}\, d\gamma_1\, d\gamma_2 \\
&= \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{\gamma_1\gamma_2} \sum_{j_1 j_2} \sum_{m_1 m_2} |\overset{1}{u}_{\gamma_1}{}^{m_1}_{j_1}\rangle\,|\overset{2}{u}_{\gamma_2}{}^{m_2}_{j_2}\rangle\, (-1)^{j_1+j_2-J}\, C^{m_1\, m_2\, M}_{j_1\, j_2\, J}\, A_{\gamma_2\gamma_1, j_2 j_1}\, d\gamma_1\, d\gamma_2\ {}^{1)}
\end{aligned}$$

[1]) Dabei wurde die Eigenschaft

$$C^{m_2\, m_1\, M}_{j_2\, j_1\, J} = (-1)^{j_1+j_2-J}\, C^{m_1\, m_2\, M}_{j_1\, j_2\, J} \tag{i}$$

benützt, die unmittelbar aus Gl. (4.3–143) folgt, wenn man dort ν durch $J_1 + J_2 - J - \nu$ ersetzt.

erhält man die Bedingung

$$\boxed{A_{\gamma_1\gamma_2, j_1 j_2} = -(-1)^{j_1+j_2-J} A_{\gamma_2\gamma_1, j_2 j_1}}\,. \tag{j}$$

Ist insbesondere $\gamma_1 = \gamma_2$ und $j_1 = j_2$, so muß $2j - J =$ ungerade sein. Weil aber j halbzahlig ist, ergibt sich — als Folge des PAULI-Prinzips —, daß J in diesem Fall nur *gerade* sein kann.

Für die Berechnung der Koeffizienten A, die durch den gewählten HAMILTON-Operator $\mathscr{H}$ bestimmt werden, bedient man sich Näherungsmethoden, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll.

b) *L—S- oder* RUSSEL-SAUNDERS-*Kopplung*

Ist im HAMILTON-Operator des einzelnen Teilchens die Spin-Bahn-Kopplung zu vernachlässigen,

$$h = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \mathscr{V}(r), \tag{k}$$

so vertauscht h mit $\vec{\ell}^{\,2}$, ℓ_z, $\vec{s}^{\,2}$ und s_z, so daß die Produkte

$$|u_{nl}^{m}\rangle\,|u_{s=\frac{1}{2}}^{\pm\frac{1}{2}}\rangle \tag{l}$$

Eigenvektoren von h zum $2(2l+1)$-fachen Energieeigenwert ε_{nl} sind.

Ist der Wechselwirkungsoperator h^{12} zwischen den beiden Fermionen ebenfalls spinunabhängig (z. B. die COULOMBsche Wechselwirkung), so können wir zunächst bei der Untersuchung des Eigenwertproblems von

$$\mathscr{H} = h^1 + h^2 + h^{12} \tag{m}$$

den Spin von der Betrachtung ausschließen. Wegen der vorausgesetzten Kugelsymmetrie von h^{12} ist es möglich, solche Eigenvektoren von $\mathscr{H}$ zu wählen, die gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{\mathscr{L}}^{\,2}$ und $\mathscr{L}_z$ ($\vec{\mathscr{L}} = \vec{\ell}^{\,1} + \vec{\ell}^{\,2}$) sind. Außerdem ist wegen $h^{12} = h^{21}$ der Gesamt-HAMILTON-Operator auch permutationsinvariant, so daß die Eigenvektoren von $\mathscr{H}$ auch gleichzeitig Eigenvektoren vom Permutationsoperator $\mathscr{P}_{(12)}$ sind.[1]) Es ist also

$$\mathscr{H}\,|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle = E_{bL}^{\pm}\,|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle \tag{n}$$

mit

$$\mathscr{P}_{(12)}\,|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle = \pm\,|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle. \tag{o}$$

Weil die Eigenvektoren $|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle$ noch nicht die beiden Elektronen voll erfassen (es fehlen noch die Spinzustände!), können sie — im Gegensatz zu Gl. (h) — sowohl symmetrisch als auch antimetrisch gegenüber Teilchenpermutationen sein. Die durch die Indizes $\pm$ sich unterscheidenden Energien $E_{b\,L}^{\pm}$ beschreiben die in 4.4 § 1a besprochene Aufhebung der Austauschentartung.

Die Eigenvektoren $|u_{b\;L}^{\pm\,M_L}\rangle$ lassen sich aus den Produkten der Einteilchenbahnvektoren

$$|u_{n_1\,l_1}^{1\;m_1}\rangle\,|u_{n_2\,l_2}^{2\;m_2}\rangle$$

aufbauen. Die WIGNER-Koeffizienten ergeben die der Kugelsymmetrie angepaßten

[1]) Die Permutationsoperatoren vertauschen mit den Drehoperatoren.

Eigenvektoren nullter Näherung

$$\boxed{|u_{n_1 n_2 l_1 l_2}{}^{M_L}_{L}\rangle = \sum_{m_1 m_2} |u^1_{n_1}{}^{m_1}_{l_1}\rangle\, |u^2_{n_2}{}^{m_2}_{l_2}\rangle\, C^{m_1\, m_2\, M_L}_{l_1\, l_2\, L}}\,, \tag{p}$$

die Eigenvektoren zu $\vec{\mathscr{L}}^2$, $\mathscr{L}_z$, $\vec{\ell}^{1\,2}$ und $\vec{\ell}^{2\,2}$ sind. Dabei gilt wieder nach Gl. (4.3–142)

$$\left.\begin{aligned} M_L &= m_1 + m_2 \\ L &= l_1 + l_2,\quad l_1 + l_2 - 1, \ldots, |l_1 - l_2|. \end{aligned}\right\} \tag{q}$$

Die exakten Eigenvektoren von $\mathscr{H}$ sind Linearkombinationen über alle n_1, n_2, l_1, l_2 („*Konfigurationsmischung*")

$$\boxed{|u^{\pm}_{b}{}^{M_L}_{L}\rangle = \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{n_1 n_2} \sum_{l_1 l_2} |u_{n_1 n_2 l_1 l_2 L}{}^{M_L}\rangle\, B^{\pm}_{n_1 n_2, l_1 l_2}\, dn_1\, dn_2}\,. \tag{r}$$

Durch eine Überlegung analog zu jener bei der j—j-Kopplung erhalten wir aus Gl. (o), daß die Koeffizienten $B^{\pm}$ der Gleichung

$$\boxed{B^{\pm}_{n_1 n_2, l_1 l_2} = \pm\, (-1)^{l_1 + l_2 - L}\, B^{\pm}_{n_2 n_1, l_2 l_1}} \quad \begin{matrix}(+\ \text{symmetrisch})\\(-\ \text{antimetrisch})\end{matrix} \tag{s}$$

genügen.

Ist insbesondere $n_1 = n_2$ und $l_1 = l_2 = l$ („*äquivalente*" *l-Fermionen*), so ergibt sich für jedes $B \neq 0$

$$(-1)^{2l-L} = \pm 1, \tag{t}$$

d. h., die Anschlußfunktionen (p) sind in diesem Fall bereits symmetrisch oder antimetrisch gegenüber Teilchenvertauschung, je nachdem, ob L gerade oder ungerade ist.

Für die explizite Berechnung der Koeffizienten B aus dem vorgegebenen Hamilton-Operator $\mathscr{H}$ bedient man sich wieder Näherungsmethoden.

Weil im Hamilton-Operator (m) keine Spinabhängigkeit vorausgesetzt wurde, konnten wir bisher so tun, als ob die Teilchen keinen Spin hätten. Wäre der unitäre Raum beider Teilchen einfach ein Produktraum $\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2$, so könnte man den Spin einfach dadurch erfassen, daß man die Eigenvektoren (r) mit irgendeiner Linearkombination der vier Produkte der beiden Spinvektoren

$$\alpha\, |u^1_{s=\frac12}{}^{+\frac12}\rangle\, |u^2_{s=\frac12}{}^{+\frac12}\rangle + \beta\, |u^1_{s=\frac12}{}^{+\frac12}\rangle\, |u^2_{s=\frac12}{}^{-\frac12}\rangle + \gamma |u^1_{s=\frac12}{}^{-\frac12}\rangle\, |u^2_{s=\frac12}{}^{+\frac12}\rangle + \delta\, |u^1_{s=\frac12}{}^{-\frac12}\rangle\, |u^2_{s=\frac12}{}^{-\frac12}\rangle$$

multipliziert. Damit würde man aber dem Fermionencharakter nicht gerecht werden, weil die Gesamtvektoren beider Teilchen (also bei Einschluß des Spins) im $\mathfrak{U}_2^-$ $= (\mathfrak{U}^1 \times \mathfrak{U}^2)^-$ liegen, d. h. antimetrisch sein müssen. Es sind daher die symmetrischen bzw. antimetrischen Bahneigenvektoren $|u^{\pm}_{b}{}^{M_L}_{L}\rangle$ mit antimetrischen bzw. symmetrischen Spineigenvektoren zu kombinieren. Die in Aufg. 107 gewonnenen Gesamtspineigenvektoren $|u_S^{M_S}\rangle$ haben gerade die Eigenschaft, für $S = 0$ antimetrisch und für $S = 1$ symmetrisch gegen Teilchenpermutation zu sein.[1]) Die Zwei-Fermionen-

[1]) Dies ersieht man auch aus Gl. (t), wenn man sie in den Spinquantenzahlen formuliert, $(-1)^{1-S} = \pm 1$.

zustände lauten daher bei L—S-Kopplung

$$|u_{b\ L\ S}^{-\ M_L M_S}\rangle = \begin{cases} |u_{b\ L}^{+\ M_L}\rangle\, |u_{S=0}^{M_S=0}\rangle \\ |u_{b\ L}^{-\ M_L}\rangle\, |u_{S=1}^{M_S}\rangle\,. \end{cases} \tag{u}$$

Über das PAULI-*Prinzip wird also die Gesamtspinquantenzahl S mit der Symmetrie und Antimetrie der Bahneigenvektoren verknüpft.* Man bezeichnet daher die Multipletterme $E_{bL}^{\pm}$ mit

$$E_b(^{2S+1}L)\,,$$

im Fall von zwei Elektronen also mit $E_b(^1L)$ und $E_b(^3L)$.[1])

Für zwei *äquivalente* l-Fermionen ($n_1 = n_2$, $l_1 = l_2 = l$) folgt, daß das PAULI-Prinzip in diesem Fall nur

$$L + S = \text{gerade} \tag{v}$$

erlaubt. Beispiele:

α) Zwei äquivalente s-Elektronen ($l = 0$):

$$L = 0,\ S = 0,\ \text{d. h. } {}^1S, \text{ ist erlaubt,}$$

aber (v₀)

$$L = 0,\ S = 1,\ \text{d. h. } {}^3S, \text{ ist verboten.} \tag{v$_0$}$$

β) Zwei äquivalente p-Elektronen ($l = 1$, $L = 0, 1, 2$):

$$\begin{gathered} {}^1S,\ {}^3P,\ {}^1D \text{ sind erlaubt,} \\ {}^3S,\ {}^1P,\ {}^3D \text{ sind verboten.} \end{gathered} \tag{v$_1$}$$

---

[1]) Bei *mehr* als 2 Fermionen ist zu beachten, daß es außer den symmetrischen und antimetrischen Eigenvektoren auch solche gibt, die sich nach den mehrdimensionalen irreduziblen Darstellungen der Permutationsgruppe transformieren (vgl. 4.4 § 3, 5.4 § 4 u. 5 und Aufg. 108). Zum Beispiel hat man nach 5.4–40 für 3 gleiche Teilchen die Bahnvektoren

$$|u_{b\ L}^{\Gamma_1\ M_L}\rangle,\ |u_{b\ L}^{\Gamma_2\ M_L}\rangle,\ |u_{b\ L}^{\Gamma_3\ M_L}\rangle.$$

Bei den Spinvektoren ist zu bedenken, daß es für 3 Spins mit $s = 1/2$ keine antimetrischen Vektoren (Γ_2) gibt [die SLATER-Determinante hätte zwei gleiche Zeilen]. Ferner kann man leicht sehen, daß die Spinvektoren der identischen Darstellung Γ_1 zum Gesamtspin $S = 3/2$ und jene der zweidimensionalen Darstellung Γ_3 zum Gesamtspin $S = 1/2$ gehören, also

$$|u^{\Gamma_1\ M_S}_{\ \ S=\frac{3}{2}}\rangle,\ |u^{\Gamma_3\ M_S}_{\ \ S=\frac{1}{2}}\rangle.$$

Um dem Fermionencharakter der 3 Teilchen gerecht zu werden, sind die Bahnvektoren mit den Spinvektoren so zu kombinieren, daß die entstehenden Gesamtvektoren $|u_{b\ L\ S}^{-\ M_L M_S}\rangle$ zur antimetrischen Darstellung Γ_2 gehören. Dies erreicht man einerseits, indem man einen antimetrischen Bahnvektor $|u_{b\ L}^{\Gamma_2\ M_L}\rangle$ mit dem symmetrischen Spinvektor $|u^{\Gamma_1\ M_S}_{\ \ S=\frac{3}{2}}\rangle$ kombiniert und damit die Energieterme $E_b(^4L)$ beschreibt. Andererseits kann man aber wegen $\Gamma_3 \times \Gamma_3 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3$ [vgl. Gl. (5.4–47)] aus den Bahnvektoren $|u_{b\ L}^{\Gamma_3\ M_L}\rangle$ und den Spinvektoren $|u^{\Gamma_3\ M_S}_{\ \ S=\frac{1}{2}}\rangle$ eine solche Linearkombination bilden, die ebenfalls antimetrisch ist und Energieterme $E_b(^2L)$ liefert.

Bei 2 *inäquivalenten l*-Fermionen ($n_1 \neq n_2$, $l_1 = l_2 = l$) hingegen sind alle Multipletts erlaubt, also z. B. für $l = 0$

$$^1S \text{ und } ^3S.$$

Bisher haben wir die *Spin-Bahn-Kopplung* völlig vernachlässigt. Bei ihrer Berücksichtigung lauten die Energieeigenvektoren, die gleichzeitig Eigenvektoren von $\vec{\mathcal{J}}^2$ und $\mathcal{J}_z$ sind,

$$\boxed{|u_{a\,J}^{-\,M}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{b} \sum_{L\,S} \sum_{M_L\,M_S} |u_{b\,L\,S}^{-\,M_L\,M_S}\rangle\, C_{L\;S\;J}^{M_L\,M_S\,M}\, D_{b,\,LS}\,\mathrm{d}b}, \tag{w}$$

wobei

$$J = L + S, \quad L + S - 1, \ldots, |L - S| \tag{x}$$

ist. Die zugehörigen Terme bezeichnet man mit

$$^{2S+1}L_J\,.$$

Wird die Spin-Bahn-Wechselwirkung größer als die COULOMBsche Wechselwirkung, so nähert man sich dem Grenzfall der j—j-Kopplung. Das Zwischengebiet bezeichnet man als „*intermediäre Kopplung*".

111, S. 333: Aus

$$\begin{aligned}|\Phi^-\rangle &= |\bar{u}_{\mathfrak{p}_1 m_1, \mathfrak{p}_2 m_2}\rangle\, \Delta^3 p \\ &= \frac{1}{\sqrt{2!}}\left(|\overset{1}{u}_{\mathfrak{p}_1 m_1}\rangle\, |\overset{2}{u}_{\mathfrak{p}_2 m_2}\rangle - |\overset{1}{u}_{\mathfrak{p}_2 m_2}\rangle\, |\overset{2}{u}_{\mathfrak{p}_1 m_1}\rangle\right) \Delta^3 p\end{aligned}$$

folgt für die Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned}w_{\mathfrak{r}_1 m_1, \mathfrak{r}_2 m_2} &= |\langle \bar{u}_{\mathfrak{r}_1 m_1, \mathfrak{r}_2 m_2} \mid \Phi^-\rangle|^2 \cdot (\Delta^3 x)^2 \\ &= 2!\, |\langle \mathcal{A}\, \overset{1}{u}_{\mathfrak{r}_1 m_1} \overset{2}{u}_{\mathfrak{r}_2 m_2} \mid \Phi^-\rangle|^2\, (\Delta^3 x)^2 \\ &= 2!\, |\langle \overset{1}{u}_{\mathfrak{r}_1 m_1} \overset{2}{u}_{\mathfrak{r}_2 m_2} \mid \Phi^-\rangle|^2\, (\Delta^3 x)^2 \\ &= \left| \begin{vmatrix} \langle u_{\mathfrak{r}_1 m_1} \mid u_{\mathfrak{p}_1 m_1}\rangle & \langle u_{\mathfrak{r}_1 m_1} \mid u_{\mathfrak{p}_2 m_2}\rangle \\ \langle u_{\mathfrak{r}_2 m_2} \mid u_{\mathfrak{p}_1 m_1}\rangle & \langle u_{\mathfrak{r}_2 m_2} \mid u_{\mathfrak{p}_2 m_2}\rangle \end{vmatrix} \Delta^3 x\, \Delta^3 p \right|^2 \\ &= \left(\frac{\Delta^3 x\, \Delta^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\right)^2 \left| \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathfrak{p}_1\mathfrak{r}_1 + \mathfrak{p}_2\mathfrak{r}_2)} - \delta_{m_1 m_2}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(\mathfrak{p}_2\mathfrak{r}_1 + \mathfrak{p}_1\mathfrak{r}_2)} \right|^2 \\ &= \left(\frac{\Delta^3 x\, \Delta^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\right)^2 \left(1 + \delta_{m_1 m_2} - 2\cos\frac{(\mathfrak{p}_2 - \mathfrak{p}_1)(\mathfrak{r}_2 - \mathfrak{r}_1)}{\hbar} \cdot \delta_{m_1 m_2}\right).\end{aligned}$$

Für $m_1 \neq m_2$ ergibt sich dasselbe Ergebnis wie ohne Spin

$$w_{\mathfrak{r}_1 m_1, \mathfrak{r}_2 m_2} = \left(\frac{\Delta^3 x\, \Delta^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\right)^2, \quad (m_1 \neq m_2).$$

Für $m_1 = m_2 = m$ hingegen folgt

$$w_{\mathfrak{r}_1 m, \mathfrak{r}_2 m} = \left(\frac{\Delta^3 x\, \Delta^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\right)^2 4\sin^2\frac{(\mathfrak{p}_2 - \mathfrak{p}_1)(\mathfrak{r}_2 - \mathfrak{r}_1)}{2\hbar},$$

d. h., $\mathfrak{r}_1 = \mathfrak{r}_2$, $m_1 = m_2$ ist verboten (PAULI-Prinzip).

112, S. 350: Setzen wir in Gl. (4.5–39) eine Summe von Zwei-Teilchenwechselwirkungsoperatoren ein

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu}^{N} \mathscr{k}^{\mu\nu}, \qquad (\mathscr{k}^{\mu\nu} = \mathscr{k}^{\nu\mu}),$$

so vereinfachen sich die Matrixelemente zu

$$\langle \overset{1}{v}_{k_1} \dots \overset{\mu}{v}_{k_\mu} \dots \overset{\nu}{v}_{k_\nu} \dots \overset{N}{v}_{k_N} \mid \mathscr{k}^{\mu\nu} \overset{1}{v}_{k_1'} \dots \overset{\mu}{v}_{k_\mu'} \dots \overset{\nu}{v}_{k_\nu'} \dots \overset{N}{v}_{k_N'} \rangle$$

$$= \delta(k_1, k_1') \dots \langle \overset{\mu}{v}_{k_\mu} \overset{\nu}{v}_{k_\nu} \mid \mathscr{k}^{\mu\nu} \overset{\mu}{v}_{k_\mu'} \overset{\nu}{v}_{k_\nu'} \rangle \dots \delta(k_N, k_N').$$

Mit

$$\varepsilon(k_\mu, k_\nu; k_\mu', k_\nu') \equiv \langle \overset{\mu}{v}_{k_\mu} \overset{\nu}{v}_{k_\nu} \mid \mathscr{k}^{\mu\nu} \overset{\mu}{v}_{k'_\mu} \overset{\nu}{v}_{k_\nu'} \rangle = \varepsilon(k_\nu, k_\mu; k_\nu', k_\mu')$$

erhält man also

$$\mathscr{L} = \frac{1}{N!\,2} \sum_{\mu \neq \nu}^{N} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1 \dots k_N} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_\mu' k_\nu'} \mid v^-_{k_1 k_2 \dots k_\mu \dots k_\nu \dots k_N} \rangle\, \varepsilon(k_\mu, k_\nu\,; k_\mu', k_\nu') \langle v^-_{k_1 k_2 \dots k_\mu' \dots k_\nu' \dots k_N} \mid \mathrm{d}k_1 \dots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k_\mu'\, \mathrm{d}k_\nu'.$$

Ersetzen wir die Indizes $k_\mu \leftrightarrow k_1$, $k_\nu \leftrightarrow k_2$, $k_\mu' = k_1'$, $k_\nu' = k_2'$ und berücksichtigen außerdem die Antimetrie der Zustände $|v^-\rangle$, so ergibt die Summe über μ und ν $N(N-1)$ gleiche Glieder, und wir erhalten

$$\mathscr{L} = \frac{N(N-1)}{N!\,2} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1 \dots k_N} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1' k_2'} \mid v^-_{k_1 k_2 k_3 \dots k_N} \rangle\, \varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2') \langle v^-_{k_1' k_2' k_3 \dots k_N} \mid \mathrm{d}k_1 \cdots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k_1'\, \mathrm{d}k_2'.$$

Wegen

$$|v^-_{k_1 k_2 k_3 \dots k_N}\rangle = a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} |v^-_{k_3 \dots k_N}\rangle$$

und

$$\langle v^-_{k_1' k_2' k_3 \dots k_N}| = \langle v^-_{k_3 \dots k_N}|\, a_{k_2'} a_{k_1'}$$

können wir auch schreiben

$$\mathscr{L} = \frac{N(N-1)}{N!\,2} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1 \dots k_N} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1' k_2'} a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} \mid v^-_{k_3 \dots k_N} \rangle\, \varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2') \langle v^-_{k_3 \dots k_N} \mid a_{k_2'} a_{k_1'} \mathrm{d}k_1 \dots \mathrm{d}k_N\, \mathrm{d}k_1'\, \mathrm{d}k_2'.$$

Die Summation über $k_3 \dots k_N$ ergibt wegen der Vollständigkeit der Vektoren $|v^-_{k_3 \dots k_N}\rangle$ im $\mathfrak{U}^-_{N-2}$ [Gl. (4.5–15)] $(N-2)!$, so daß wir erhalten

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2} \mathop{\mathrlap{\int}\sum}_{k_1 k_2, k_1' k_2'} a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} \varepsilon(k_1, k_2; k_1', k_2')\, a_{k_2'} a_{k_1'}\, \mathrm{d}k_1\, \mathrm{d}k_2\, \mathrm{d}k_1'\, \mathrm{d}k_2'.$$

Diese Gleichung, die zunächst in irgendeinem $\mathfrak{U}^-_N$ bewiesen ist, gilt nach dem in der Fußnote von S. 340 Gesagten auch im $\mathfrak{U}^-$, wenn man die linke Seite durch

$$\frac{1}{2} \sum_{N} \mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N} \sum_{\mu \neq \nu}^{N} \mathscr{k}^{\mu\nu}\, \mathscr{P}_{\mathfrak{U}^-_N}$$

ersetzt, wofür wir wieder kurz $\frac{1}{2} \sum\limits_{\mu \neq \nu} \mathscr{k}^{\mu\nu}$ schreiben.

113, S. 350: Der Operator $\overset{\circ}{a}_k$ ist nach Gl. (3.2–29) gegeben durch

$$\overset{\circ}{a}_k = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\sum_\nu h^\nu + \frac{1}{2}\sum_{\mu\neq\nu} h^{\mu\nu},\ a_k\right].$$

Der Kommutator mit der ersten Summe wurde bereits in 4.5 § 6 d berechnet. Zur Bestimmung des Kommutators mit der Wechselwirkung berücksichtigen wir, daß nach den Gleichungen (4.5–32, 68 und 70) gilt

$$\begin{aligned}
&\left[a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} a_{k_2'} a_{k_1'},\ a_k\right] = -\left[a^\dagger_{k_1} a^\dagger_{k_2} a_{k_1'} a_{k_2'},\ a_k\right] \\
&= \left[a^\dagger_{k_1} a_{k_1'} a^\dagger_{k_2} a_{k_2'},\ a_k\right] - \left[a^\dagger_{k_1} a_{k_2'},\ a_k\right]\delta(k_2, k_1') \\
&= a^\dagger_{k_1} a_{k_1'}\left[a^\dagger_{k_2} a_{k_2'},\ a_k\right] + \left[a^\dagger_{k_1} a_{k_1'},\ a_k\right] a^\dagger_{k_2} a_{k_2'} - \left[a^\dagger_{k_1} a_{k_2'},\ a_k\right]\delta(k_2, k_1') \\
&= -\,\delta(k_2, k)\, a^\dagger_{k_1} a_{k_1'} a_{k_2'} - \delta(k_1, k)\, a_{k_1'} a^\dagger_{k_2} a_{k_2'} + \delta(k_1, k)\,\delta(k_2, k_1')\, a_{k_2'} \\
&= -\,\delta(k_2, k)\, a^\dagger_{k_1} a_{k_1'} a_{k_2'} + \delta(k_1, k)\, a^\dagger_{k_2} a_{k_1'} a_{k_2'}\,.
\end{aligned} \tag{a}$$

Hieraus folgt, wenn man die Symmetrie [Gl. (4.5–99)] beachtet,

$$\left[\sum_{\mu\neq\nu} h^{\mu\nu},\ a_k\right] = -\,2 \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_2 k_1' k_2'} \varepsilon(k, k_2; k_1', k_2')\, a^\dagger_{k_2} a_{k_2'} a_{k_1'}\, \mathrm{d}k_2\, \mathrm{d}k_1'\, \mathrm{d}k_2'\,.$$

Insgesamt erhalten wir also

$$\boxed{\begin{aligned} -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\overset{\circ}{a}_k &= \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k'} \varepsilon(k, k')\, a_{k'}\, \mathrm{d}k' \\ &+ \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_{k_2 k_1' k_2'} \varepsilon(k, k_2; k_1', k_2')\, a^\dagger_{k_2} a_{k_2'} a_{k_1'}\, \mathrm{d}k_2\, \mathrm{d}k_1'\, \mathrm{d}k_2' \end{aligned}}\,. \tag{b}$$

In den Feldoperatoren $\psi_m(\mathfrak{r})$ lautet diese Gleichung

$$\boxed{\begin{aligned} -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\overset{\circ}{\psi}_m(\mathfrak{r}) &= \sum_{m'}\int_{\mathfrak{r}'} \varepsilon(\mathfrak{r}m, \mathfrak{r}'m')\, \psi_{m'}(\mathfrak{r}')\, \mathrm{d}^3x' \\ &+ \sum_{m_2 m_1' m_2'}\int_{\mathfrak{r}_2\mathfrak{r}_1'\mathfrak{r}_2'} \varepsilon(\mathfrak{r}m, \mathfrak{r}_2 m_2; \mathfrak{r}_1' m_1', \mathfrak{r}_2' m_2')\, \psi^\dagger_{m_2}(\mathfrak{r}_2)\, \psi_{m_2'}(\mathfrak{r}_2')\, \psi_{m_1'}(\mathfrak{r}_1')\, \mathrm{d}^3x_2\, \mathrm{d}^3x_1'\, \mathrm{d}^3x_2' \end{aligned}}\,. \tag{c}$$

Berücksichtigt man für Elektronen, die sich in einem äußeren Potential $\mathscr{V}(\vec{x})$ befinden, auch ihre COULOMBsche Wechselwirkung, so hat der HAMILTON-Operator die Gestalt

$$\mathscr{H} = \sum_\nu \left(\frac{\vec{p}^{\nu 2}}{2m} + \mathscr{V}(\vec{x}^\nu)\right) + \frac{1}{2}\sum_{\mu\neq\nu} \frac{q^2}{|\vec{x}^\mu - \vec{x}^\nu|}\,.$$

Beachtet man die Beziehungen (4.5–52 u. 100), so geht in diesem Fall die Gl. (c) über in

$$\boxed{-\frac{\hbar}{i}\,\overset{\circ}{\psi}_m(\mathfrak{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathfrak{r}} + V(\mathfrak{r})\right)\psi_m(\mathfrak{r}) + q^2\sum_{m'}\int_{\mathfrak{r}'}\frac{\psi^\dagger_{m'}(\mathfrak{r}')\,\psi_{m'}(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|}\,d^3x'\cdot\psi_m(\mathfrak{r})}\,. \tag{d}$$

Dies ist — in Operatorform — die SCHRÖDINGERsche Materiefeldgleichung, in der die elektrostatische Selbstwechselwirkung mit berücksichtigt ist. Mit Hilfe der Methode der Feldquantisierung (Kap. 4.6) erhält man dieses Ergebnis direkt aus der klassischen Feldgleichung (1.6–3).

114, S. 350: Aus den Gl. (4.5–68 u. 70) folgt

$$\begin{aligned}[s_{n_1(+)}, s_{n_2(-)}] &= \hbar^2(a^\dagger_{n_1+}[a_{n_1-}, a^\dagger_{n_2-}a_{n_2+}] + [a^\dagger_{n_1+}, a^\dagger_{n_2-}a_{n_2+}]\,a_{n_1-})\\ &= \hbar^2(a^\dagger_{n_1+}a_{n_2+}\,\delta_{n_1n_2} - a^\dagger_{n_2-}a_{n_1-}\,\delta_{n_2n_1})\\ &= 2\hbar\, s_{n_1(z)}\,\delta_{n_1n_2}.\end{aligned}$$

Die Spinkomponenten derselben Lage ($n_1 = n_2$) erfüllen also die Drehimpuls-Vertauschungsrelationen (4.3–8), während jene verschiedener Lage ($n_1 \neq n_2$) miteinander vertauschen. Ebenso beweist man

$$[s_{n_1(z)}, s_{n_2(\pm)}] = \pm\hbar\, s_{n_1(\pm)}\,\delta_{n_1n_2},$$

also die Drehimpulsvertauschungsrelationen (4.3–10).

115, S. 350: Wegen $a_{n_1m_1}a_{n_1m_1} = \mathcal{O}$ laufen die Summen nur über die Indizes $(n_1m_1) \neq (n_2m_2)$. Außerdem können wir auch noch $n_1 \neq n_2$ voraussetzen, weil der Operator $a_{n_1m_1}a_{n_1m_2}$ nur auf solche Zustände ein von Null verschiedenes Ergebnis liefert, bei denen zwei Elektronen in der Lage n_1 sich befinden, was wir ausgeschlossen haben.

Die Vertauschungsrelationen (4.5–32) und die Bedingung (4.5–103) ergeben

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_C &= \frac{1}{2}\sum_{n_1n_2}\sum_{m_1m_2} a^\dagger_{n_1m_1}a_{n_1m_1}a^\dagger_{n_2m_2}a_{n_2m_2}K_{n_1n_2}\\ &= \frac{1}{2}\sum_{n_1\neq n_2}(\mathcal{N}_{n_1+} + \mathcal{N}_{n_1-})(\mathcal{N}_{n_2+} + \mathcal{N}_{n_2-})\,K_{n_1n_2}\\ &= \frac{1}{2}\sum_{n_1\neq n_2}K_{n_1n_2}\,\mathit{1},\end{aligned}$$

sowie

$$\mathcal{H}_A = \frac{1}{2}\sum_{n_1\neq n_2}(\mathcal{A}_{n_1n_2} + \mathcal{B}_{n_1n_2})\,J_{n_1n_2}$$

mit

$$\mathscr{A}_{n_1 n_2} = a^\dagger_{n_1+} a^\dagger_{n_2-} a_{n_1-} a_{n_2+} + a^\dagger_{n_1-} a^\dagger_{n_2+} a_{n_1+} a_{n_2-}$$
$$= -\,(a^\dagger_{n_1+} a_{n_1-} a^\dagger_{n_2-} a_{n_2+} + a^\dagger_{n_1-} a_{n_1+} a^\dagger_{n_2+} a_{n_2-})$$
$$= -\frac{1}{\hbar^2}(\sigma_{n_1(+)}\sigma_{n_2(-)} + \sigma_{n_1(-)}\sigma_{n_2(+)})$$
$$= -\frac{2}{\hbar^2}(\sigma_{n_1(x)}\sigma_{n_2(x)} + \sigma_{n_1(y)}\sigma_{n_2(y)})$$

und

$$\mathscr{B}_{n_1 n_2} = a^\dagger_{n_1+} a^\dagger_{n_2+} a_{n_1+} a_{n_2+} + a^\dagger_{n_1-} a^\dagger_{n_2-} a_{n_1-} a_{n_2-}$$
$$= -\,(a^\dagger_{n_1+} a_{n_1+} a^\dagger_{n_2+} a_{n_2+} + a^\dagger_{n_1-} a_{n_1-} a^\dagger_{n_2-} a_{n_2-})$$
$$= -\,(\mathscr{N}_{n_1+}\mathscr{N}_{n_2+} + \mathscr{N}_{n_1-}\mathscr{N}_{n_2-})$$
$$= -\frac{2}{\hbar^2}\sigma_{n_1(z)}\sigma_{n_2(z)} - \frac{1}{2}\mathbf{1}\,.$$

Also ist

$$\mathscr{H}_A = -\sum_{n_1 \neq n_2} J_{n_1 n_2}\left(\frac{1}{\hbar^2}\vec{\sigma}_{n_1}\vec{\sigma}_{n_2} + \frac{1}{4}\mathbf{1}\right).$$

116, S. 355: Für die Komponenten des Gesamtfeldimpulses $\mathscr{P}_i$ [Gl. (4.6–11)] lauten die Gleichungen (4.6–24 u. 25)

$$[\mathscr{P}_i, \psi(\mathfrak{r})] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(\mathfrak{r})}{\partial x_i}$$

und

$$[\mathscr{P}_i, \psi^\dagger(\mathfrak{r})] = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi^\dagger(\mathfrak{r})}{\partial x_i}\,. \qquad \text{(a)}$$

Hieraus ergibt sich für den Kommutator

$$\int[\mathscr{P}_i, \psi^\dagger x_k \psi]\,\mathrm{d}^3x = \int([\mathscr{P}_i, \psi^\dagger]\,x_k\psi + \psi^\dagger x_k[\mathscr{P}_i, \psi])\,\mathrm{d}^3x$$
$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\left(\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x_i}x_k\psi + \psi^\dagger x_k\frac{\partial\psi}{\partial x_i}\right)\mathrm{d}^3x$$
$$= -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int\left(\frac{\partial}{\partial x_i}(\psi^\dagger x_k\psi) - \psi^\dagger\psi\,\delta_{ik}\right)\mathrm{d}^3x$$
$$= +\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta_{ik}\int\psi^\dagger\psi\,\mathrm{d}^3x,$$

oder

$$[\mathscr{P}_i, \mathscr{X}_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta_{ik}\mathbf{1} \qquad \text{(b)}$$

[Vgl. dazu Aufg. 26.]

117, S. 365: Aus Gl. (4.6–24 u. 25) folgt

$$[\mathscr{H}, \psi(\mathfrak{r})] = -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\mathfrak{r} + V(\mathfrak{r})\right)\psi(\mathfrak{r})$$

und

$$[\mathscr{H}, \psi^\dagger(\mathfrak{r})] = +\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\mathfrak{r} + V(\mathfrak{r})\right)\psi^\dagger(\mathfrak{r}).$$

Daher ist

$$\overset{\circ}{\mathcal{N}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathcal{H}, \mathcal{N}] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int ([\mathcal{H}, \psi^\dagger]\,\psi + \psi^\dagger\,[\mathcal{H}, \psi])\,\mathrm{d}^3x = \mathcal{O}.$$

118, S. 366: Die Gln. (4.6–58, 83 u. 85) ergeben

$$\langle u^{\pm}_{l_1 l_2} \mid \mathcal{H}_W\, u^{\pm}_{l_3 l_4}\rangle = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \ldots k_4} \langle 0 \mid c_{l_2}\, c_{l_1}\, c^\dagger_{k_1}\, c^\dagger_{k_2}\, \varepsilon_{k_1 k_2; k_3 k_4}\, c_{k_4}\, c_{k_3}\, c^\dagger_{l_3}\, c^\dagger_{l_4} \,|0\rangle\, \mathrm{d}k_1 \ldots dk_4.$$

Nach den Vertauschungsrelationen für Bosonen bzw. Fermionen ist

$$c_{k_4}\, c_{k_3}\, c^\dagger_{l_3}\, c^\dagger_{l_4} = \delta_{k_3 l_3}\, c_{k_4}\, c^\dagger_{l_4} \pm c_{k_4}\, c^\dagger_{l_3}\, c_{k_3}\, c^\dagger_{l_4},$$

woraus bei Anwendung auf $|0\rangle$ folgt

$$c_{k_4}\, c_{k_3}\, c^\dagger_{l_3}\, c^\dagger_{l_4}\,|0\rangle = (\delta_{k_3 l_3}\,\delta_{k_4 l_4} \pm \delta_{k_4 l_3}\,\delta_{k_3 l_4})\,|0\rangle$$

und analog

$$c_{k_2}\, c_{k_1}\, c^\dagger_{l_1}\, c^\dagger_{l_2}|0\rangle = (\delta_{k_1 l_1}\,\delta_{k_2 l_2} \pm \delta_{k_2 l_1}\,\delta_{k_1 l_2})\,|0\rangle.$$

Damit findet man

$$\langle u^{\pm}_{l_1 l_2} \mid \mathcal{H}_W\, u^{\pm}_{l_3 l_4}\rangle = \frac{1}{2}(\varepsilon_{l_1 l_2;\, l_3 l_4} \pm \varepsilon_{l_1 l_2;\, l_4 l_3} \pm \varepsilon_{l_2 l_1;\, l_3 l_4} + \varepsilon_{l_2 l_1;\, l_4 l_3}).$$

Berücksichtigt man

$$\varepsilon_{l_1 l_2;\, l_3 l_4} = \langle \overset{1}{u}_{l_1}\, \overset{2}{u}_{l_2} \mid \frac{q^2}{|\vec{x}1 - \vec{x}2|}\, \overset{1}{u}_{l_3}\, \overset{2}{u}_{l_4}\rangle,$$

so resultiert

$$\langle u^{\pm}_{l_1 l_2} \mid \mathcal{H}_W\, u^{\pm}_{l_3 l_4}\rangle = \langle u^{\pm}_{l_1 l_2} \mid \frac{q^2}{|\vec{x}1 - \vec{x}2|}\, u^{\pm}_{l_3 l_4}\rangle.$$

Dieses jetzt quantenfeldtheoretisch hergeleitete Ergebnis ist natürlich identisch mit den Aussagen von 4.5 § 6e.

119, S. 370: Die Gln. (4.7–2, 6 u. 8) liefern

$$|u^{(+)}_a\rangle = \lim_{t \to -\infty} \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathcal{H} - E_a)t}\, |\overset{0}{u}_a\rangle = \lim_{t \to -\infty} \mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}t}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}\, |\overset{0}{u}_a\rangle.$$

Daher gilt

$$\langle u^{(+)}_{a'} \mid u^{(+)}_a\rangle = \langle \overset{0}{u}_{a'} \mid \overset{0}{u}_a\rangle = \delta(a', a).$$

120, S. 378: Die Beziehungen (4.7–1 bis 17a) bleiben auch bei eindimensionalen Streuproblemen gültig. Für die Greensche Funktion $G_0^{(+)}$ ergibt sich eine Modifikation. In der *Impulsdarstellung* lautet sie

$$G_0^{(+)}(p, p') = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{E_k - \dfrac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon}\,\delta(p - p') \quad \text{mit} \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{a}$$

Die Integralgleichung für $u_k^{(+)}(p)$ nimmt daher die Gestalt

$$u_k^{(+)}(p) = \sqrt{\hbar}\,\delta(p - \hbar k) + \lim_{\varepsilon\to+0} \frac{1}{E_k - \dfrac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} V(p, p')\, u_k^{(+)}(p')\, \mathrm{d}p' \tag{b}$$

an.

Die GREENsche Funktion in der *Ortsdarstellung* erhalten wir durch FOURIER-Transformation

$$G_0^{(+)}(x, x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\varepsilon\to+0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(x-x')p}}{E_k - \dfrac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon}\, \mathrm{d}p.$$

Das Integral berechnen wir wieder in der komplexen p-Ebene durch Anwendung des CAUCHYschen Integralsatzes. Für $x - x' > 0$ verwenden wir denselben Integrationsweg, wie in Fig. 87, S. 372. Der Beitrag längs des Halbkreises verschwindet, wenn der Radius unendlich groß wird. Man erhält daher

$$G_0^{(+)}(x, x') = \frac{m}{\pi\hbar}\, 2\pi\mathrm{i} \lim_{\varepsilon\to 0} \operatorname{Res}\left(\sqrt{2m(E_k + \mathrm{i}\varepsilon)}\right) = -\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-x')k} \quad (x > x').$$

Für $x - x' < 0$ müssen wir den Integrationsweg durch einen Halbkreis in der unteren p-Ebene schließen, weil dann dessen Beitrag mit wachsendem Radius wiederum verschwindet. Der CAUCHYsche Satz liefert jetzt

$$G_0^{(+)}(x, x') = -\frac{m}{\pi\hbar}\, 2\pi\mathrm{i} \lim_{\varepsilon\to 0} \operatorname{Res}\left(-\sqrt{2m(E_k + \mathrm{i}\varepsilon)}\right) = -\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x-x')k} \quad (x < x').$$

Die beiden Ergebnisse können wir zusammenfassen zu

$$G_0^{(+)}(x, x') = -\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}|x-x'|k}. \tag{c}$$

Die Integralgleichung für die Energieeigenfunktionen $u_k^{(+)}(x)$ lautet damit

$$u_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - \frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}|x-x'|k}\, V(x')\, u_k^{(+)}(x')\, \mathrm{d}x' \tag{d}$$

oder

$$\left.\begin{aligned} u_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} &- \frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \int_{-\infty}^{x} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx'}\, V(x')\, u_k^{(+)}(x')\, \mathrm{d}x' \\ &- \frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \int_{x}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx'}\, V(x')\, u_k^{(+)}(x')\, \mathrm{d}x'. \end{aligned}\right\} \tag{d'}$$

Weil das Potential im Unendlichen verschwinden soll, liefert für $x \to +\infty$ das zweite Integral von (d′) keinen Beitrag, und wir erhalten [analog zu den Gleichungen (4.7–24 u. 25)]

$$u_k^{(+)}(x) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, (1 + f_+)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \quad \text{für} \quad x \to +\infty. \tag{e}$$

Die dimensionslose Größe

$$\left.\begin{aligned} f_+ &= -\sqrt{2\pi}\,\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx'} V(x')\, u_k^{(+)}(x')\,\mathrm{d}x' \\ &= -2\pi\,\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\langle u_k^0 \mid \mathscr{V}\, u_k^{(+)}\rangle \end{aligned}\right\} \tag{f}$$

beschreibt die durch das Potential bedingte Veränderung der durchgehenden Welle.

Für $x \to -\infty$ verschwindet das erste Integral von Gl. (d′), so daß für große negative x-Werte resultiert

$$u_k^{(+)}(x) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + f_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}) \quad \text{für} \quad x \to -\infty. \tag{g}$$

Die Größe

$$\left.\begin{aligned} f_- &= -\sqrt{2\pi}\,\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx'} V(x')\, u_k^{(+)}(x')\,\mathrm{d}x' \\ &= -2\pi\,\frac{\mathrm{i}m}{\hbar^2 k}\langle u_{-k}^0 \mid \mathscr{V}\, u_k^{(+)}\rangle \end{aligned}\right\} \tag{h}$$

beschreibt die Rückwärtsstreuung.

Die dynamische Streutheorie führt also gerade auf die bereits in 1.5 § 4a erwähnten Ausstrahlungsbedingungen der stationären Lösungen.

Zwischen den Größen

$$S = 1 + f_+ \quad \text{und} \quad R = f_-$$

besteht die Beziehung

$$\boxed{|S|^2 + |R|^2 = 1}\,. \tag{i}$$

Multiplizieren wir nämlich die Eigenwertgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u_k^{(+)}}{\mathrm{d}x^2} + V u_k^{(+)} = E_k u_k^{(+)}$$

mit $u_k^{(+)*}$ und die konjugiert komplexe Gleichung mit $u_k^{(+)}$, so folgt nach Subtraktion

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[u_k^{(+)*}\frac{\mathrm{d}u_k^{(+)}}{\mathrm{d}x} - u_k^{(+)}\frac{\mathrm{d}u_k^{(+)*}}{\mathrm{d}x}\right] = 0.$$

Integrieren wir diese Gleichung über ein sehr großes Intervall, $-x_0 \cdots +x_0$, so kann man an den Integrationsgrenzen $\pm x_0$ die asymptotischen Lösungen (e) und (g) einsetzen, wobei Gl. (i) resultiert.

121, S. 378: a) Nach Aufg. 91 ist

$$V(p, p') = -\frac{1}{2\pi\hbar}\,\hat{V}\,,$$

so daß aus Aufg. 120, Gl. (b) folgt

$$u_k^{(+)}(p) = \sqrt{\hbar}\,\delta(p - \hbar k) - \frac{\hat{V}}{2\pi\hbar}\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E_k - \dfrac{p^2}{2m} + \mathrm{i}\varepsilon}\int u_k^{(+)}(p')\,\mathrm{d}p'. \tag{a}$$

Diese Gleichung integrieren wir über p und beachten dabei, daß das Integral über den Limes nach Aufg. 120 durch $G_0^{(+)}(x, x)$ gegeben ist. Damit erhalten wir

$$\int u_k^{(+)}(p')\,\mathrm{d}p' = \frac{\sqrt{\hbar}}{1-a} \quad \text{mit} \quad a = \mathrm{i}\,\frac{m\hat{V}}{\hbar^2 k}.$$

b) In der Ortsdarstellung liefert Aufg. 120, Gl. (d) das Ergebnis

$$u_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + a\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|x|}\,u_k^{(+)}(0). \tag{b}$$

Setzen wir $x = 0$, so folgt

$$u_k^{(+)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{1-a}.$$

Die Funktionen $u_k^{(+)}(x)$ sind natürlich ein Spezialfall der in Aufg. 91, Teil 2, gewonnenen allgemeinen Energieeigenfunktionen. Setzt man nämlich dort

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad A_2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{a}{1-a},$$

so gelangt man zu den jetzigen Ergebnissen. Es ist nützlich, sich explizit zu überlegen, daß damit auch die dort angegebene, allgemeine Lösung in der Impulsdarstellung in unser jetziges Ergebnis (a) übergeht [Man beachte dazu die Relationen (5.1–21$_2$ u. 44)!]

***122,** S. 378: Die zu kontinuierlichen Energien E gehörigen Eigenfunktionen eines Teilchens im Potential $V(r)$ haben nach Gl. (4.3–90 u. 91) für *große Abstände* r die Gestalt

$$u_E(r \to \infty, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=l}^{-l} C_l^m \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \qquad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right). \tag{a}$$

Die Wirkung des Potentials äußert sich in den *Phasen* δ_l. Für die Behandlung des Streuproblems sind die Koeffizienten C_l^m so zu bestimmen, daß wir eine Lösung $u_E^{(+)}$ erhalten, die die Ausstrahlungsbedingung (4.7–24) erfüllt. Dazu legen wir die Polarachse in Richtung von $\mathfrak{k}$. Weil Invarianz gegenüber Drehungen um diese Richtung bestehen muß, sind alle $C_l^{m\neq 0}$ Null zu setzen. Zur Bestimmung der Größen C_l^0 benötigen wir die Entwicklung der ebenen Welle $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathfrak{k}\mathfrak{r}}$ nach den sphärischen Partiallösungen (1.5–24),

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathfrak{k}\mathfrak{r}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sqrt{4\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{2l+1}\,\mathrm{i}^l\,j_l(kr)\,Y_l^0(\theta)}\,.\,^{1)} \tag{b}$$

[1]) Diese Beziehung kann man am einfachsten dadurch herleiten, daß man die Entwicklung mit unbestimmten Koeffizienten A_l ansetzt, nach kr differenziert und mittels der Rekursionsformeln für j_l und Y_l^0 die Größen A_l bestimmt.

Für große kr ergibt die asymptotische Entwicklung der sphärischen BESSEL-Funktionen $j_l(kr)$ die Darstellung

$$e^{ikr} = \sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1}\, i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2} l\right)}{kr} Y_l^0(\theta), \qquad (kr \gg 1). \qquad \text{(b')}$$

Setzt man die Entwicklungen (a) und (b') in die Gl. (4.7–24) ein, so erhält man mit

$$C_l^0 = \frac{\sqrt{2(2l+1)}\, i^l}{2\pi k} c_l$$

für große r die Beziehung

$$f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = \frac{\sqrt{4\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1}\, i^l \left[c_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2} l + \delta_l\right) - \sin\left(kr - \frac{\pi}{2} l\right)\right] Y_l^0(\theta).$$

Der Ausdruck in der eckigen Klammer läßt sich in der Form

$$\frac{1}{2i}\left[e^{i\left(kr-\frac{\pi}{2}l\right)}(c_l e^{i\delta_l} - 1) - e^{-i\left(kr-\frac{\pi}{2}l\right)}(c_l e^{-i\delta_l} - 1)\right]$$

schreiben. Den nicht der Ausstrahlungsbedingung genügenden Term e^{-ikr}/r bringt man zum Verschwinden, wenn man

$$c_l = e^{i\delta_l}$$

setzt. Für die *Streuamplitude* folgt damit

$$\boxed{f(k,\theta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1}\, e^{i\delta_l} \sin\delta_l \cdot Y_l^0(\theta)}\,. \qquad \text{(c)}$$

Der *differentielle Wirkungsquerschnitt* $\sigma(k,\theta)$ ist nach Gl. (4.7–46) $|f(k,\theta)|^2$, also

$$\sigma(k,\theta) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)}\, e^{i(\delta_l-\delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'}\, Y_l^0(\theta)\, Y_{l'}^{0*}(\theta).$$

Den *totalen Wirkungsquerschnitt* $\sigma(k)$ erhalten wir durch Integration über den gesamten räumlichen Winkel. Wegen der Orthogonalitätsrelation (4.3–68$_1$) ergibt sich

$$\boxed{\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\sin^2\delta_l}\,. \qquad \text{(d)}$$

Die Phasenänderungen δ_l, die die einzelnen Partialwellen im Unendlichen durch die Anwesenheit des Potentials $V(r)$ erleiden, bestimmen also den Wirkungsquerschnitt. Jeder Drehimpuls l liefert einen Beitrag

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \leq \frac{4\pi}{k^2}(2l+1).$$

Hat das Streupotential eine *mittlere Reichweite* r_0, so genügt es — wenn man von Resonanzen absieht — die Summation in Gl. (d) nur über

$$l \lesssim k r_0 \tag{e}$$

zu erstrecken. Dies kann man sich durch eine halbklassische Betrachtung plausibel machen. Nur jene Teilchen, deren Abstand $d \lesssim r_0$ ist (Fig. 5, S. 24), erleiden eine merkliche Ablenkung. Ihr Drehimpuls bezüglich des Streuzentrums ist ungefähr

$$\hbar l = \hbar k d \lesssim \hbar k r_0 .$$

Diese Abschätzung führt also in der Tat auf die Behauptung (e).

Sachregister

